

UNIVERSIDAD DE CHILE FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

ESTUDIO DE LOS EFECTOS DEL ÍNDICE DE OXÍGENO SOBRE LAS PROPIEDADES DE UNA LLAMA DE DIFUSIÓN LAMINAR INVERSA

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA MENCIÓN MECÁNICA

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

FELIPE ANDRÉS ESCUDERO BARROS

PROFESOR GUÍA: JUAN CARLOS ELICER CORTÉS

MIEMBROS DE LA COMISIÓN: ANDRÉS FUENTES CASTILLO RODRIGO DEMARCO BULL

SANTIAGO DE CHILE 2014

 $\label{eq:construct} {\rm CONICYT}\mbox{-}{\rm PCHA}/{\rm Magister~Nacional}/2013\mbox{-}221320198$

Resumen

El objetivo principal del presente estudio es analizar de manera cuantitativa los efectos del índice de oxígeno (OI) en una llama de difusión laminar inversa de etileno, en términos de la producción de hollín, su temperatura, la radiación emitida por la llama y su altura. El OI se define como la fracción molar de oxígeno en el flujo de oxidante y fue variado desde 17% hasta 37%. Para el estudio se escogió un flujo de combustible constante de 2.7 slpm y de aire de 2.2 slpm donde los cambios en el OI se consiguieron dopando aire del laboratorio con oxígeno para OI>21%y con nitrógeno para OI<21%. La altura de la llama se midió mediante la emisión espontánea de radicales CH^{*} y se encontró que la altura de la zona de reacción disminuye a medida que el OI aumenta, a diferencia de la altura de la zona luminosa que aumenta debido a que el hollín continúa formándose más allá de la zona de reacción. Los perfiles radiales de fracción en volumen y temperatura de hollín fueron calculados en base a la metodología de Absorción y Emisión Modulada (MAE) a través de un posterior proceso de deconvolución y regularización. A medida que el OI se incrementa, la fracción en volumen de hollín aumenta debido a que los procesos de formación del hollín se ven favorecidos y continúan por sobre la altura de la zona de reacción de la llama, dadas las condiciones de temperatura. Sin embargo los procesos de oxidación no parecen verse afectados de manera apreciable para las condiciones estudiadas. Por lo anterior se producen mayores cantidades locales de hollín, alcanzando 3.5 ppm para OI de 37%, y también globales, cuantificadas a través de la fracción en volumen integrada con valores máximos de 3 (x 10^{-10} m²). Por lo mismo, debido a que la cantidad de hollín y la transferencia de calor por radiación están relacionadas, la potencia radiativa de la llama se ve aumentada a medida que crece el OI.

Comparando llamas normales e inversas de geometría y energía emitida similar, se puede observar que la cantidad total de hollín generada en una llama inversa es menor que en llamas normales, acentuándose la diferencia en condiciones cercanas a las ambientales. Además, el calor liberado por radiación es menor en llamas inversas para condiciones de OI bajo. Por último, la influencia del OI sobre la altura de la zona de reacción de la llama es mucho mayor en llamas normales, donde la disminución fue de un 50 % comparado con un 10 % en llamas inversas.

Abstract

The main objective of this work is to analyze quantitatively the effects of the oxygen index (OI) in an ethylene laminar inverse diffusion flame, in terms of soot production, temperature, radiation and flame height. The OI is defined as the mole fraction of oxygen in the oxidizer flow and it was varied from 17% to 37%. The fuel flow was kept constant at 2.7 slpm and the air flow fixed at 2.2 slpm. The changes in the OI were achieved doping air from the laboratory with oxygen for OI>21% and with nitrogen for OI<21%. Flame height was measured by spontaneous emission of CH* radicals and it was found that the reaction zone height decreases when the OI increases, but the luminous flame height increases because soot can still form and grow beyond the reaction zone. Radial profiles of soot volume fraction and soot temperature were deduced from Modulated Absorption/Emission (MAE) measurements through a deconvolution and regularization technique. When OI is increased the soot volume fraction is enhanced because the soot formation processes are intensified and they continue beyond the reaction zone height given the temperature conditions, however the oxidation processes were not appreciably affected, given the conditions of this study. Because of this, local quantities of soot are higher, reaching 3.5 ppm for an OI of 37%, and also the integrated soot volume fraction is higher with maximum values of around 3 (x 10^{-10} m²). Given that the quantity of soot and radiation heat transfer are connected, the total radiative loss of the flame increases with the OI.

By comparing normal and inverse flames with similar geometry and released energy, it can be seen that the total amount of soot in an inverse flame is less than in a normal flame. Also, the total radiative loss is lower in inverse flames for lower OIs. Finally, the influence of the OI in the reaction zone height is a lot higher in normal flames, where the decrease was of 50 % compared to a 10 % in inverse flames.

Agradecimientos

Agradezco a CONICYT por el financiamiento de mis estudios de postgrado a través del programa de capital humano avanzado CONICYT-PCHA/Magíster Nacional/2013 - 221320198.

Agradezco a toda mi familia por todo el apoyo y compañía durante toda la vida. A mis padres Juan y Alicia por creer en mí y proporcionarme todas las herramientas necesarias para llegar a este momento. A mis hermanos Francisca y Matías, y a Silvia por compartir todos los días buenos momentos. A mi prima Daniela y Victor por alojarme en la quinta región durante gran parte del tiempo. A María Jesús por acompañarme durante gran parte de este periodo de mi vida.

Quisiera agradecer también al profesor Juan Carlos Elicer por confiar en mí para llevar a cabo esta investigación y por sus valiosas enseñanzas. A los profesores Andrés Fuentes y Rodrigo Demarco por estar día a día ayudando y compartiendo buenos momentos mientras se avanzaba en esta investigación. A Fengshan Liu, Jean-Louis Consalvi y Fatiha Nmira por sus valiosos comentarios y aportes que ayudaron en este trabajo. A Gonzalo por su gran ayuda en la implementación del laboratorio.

A mis infaltables amigos. Muchas gracias a quienes me acompañaron empezando este trayecto en plan común y a todos los mecánicos que continuaron hasta el final por hacer que cada estudio, tarea o reunión extraprogramática fuera más agradable. A mis amigos del colegio y de la vida por proporcionarme momentos de distensión y muchas alegrías. A los recientemente conocidos amigos de la UTFSM del grupo EC^2G por compartir gran parte de este periodo de tiempo y conformar un gran equipo de trabajo.

Por último pero no menos importante, quisiera agradecer a la Escuela de Ingeniería que ha sido mi casa de estudios durante estos últimos años y un segundo hogar. A todos los profesores y funcionarios del Departamento de Ingeniería Mecánica por ayudarme a llegar a este momento.

A todos, muchas gracias.

Tabla de contenido

Re	esum	en		Ι				
A	Abstract							
Agradecimientos								
N	omen	ıclatur	a	IX				
1.	Intr	oducci	ón	1				
	1.1.	Objeti	vo General	2				
	1.2.	Objeti	vos Específicos	2				
2.	Antecedentes							
	2.1.	Bioma	sa	4				
	2.2.	Hollín		5				
		2.2.1.	Características	6				
		2.2.2.	Mecanismos de formación	7				
	2.3.	Llama	s de difusión laminar	8				
		2.3.1.	Llamas de difusión normales	9				
		2.3.2.	Llamas de difusión inversas	11				
3.	Mar	rco teó	rico	16				
	3.1.	Fraccio	ón en volumen de hollín	16				
		3.1.1.	Deconvolución de Onion-Peeling	18				

		3.1.2.	Regularización de Tikhonov	19
	3.2.	Tempe	ratura del hollín	24
	3.3.	Altura	de la llama	27
	3.4.	Anális	is del error	28
		3.4.1.	Fracción en volumen de hollín	28
		3.4.2.	Temperatura	29
		3.4.3.	Altura de la llama	30
4.	Met	odolog	gía experimental	31
	4.1.	Instala	ción experimental	31
	4.2.	Quema	ador inverso y condiciones experimentales	32
	4.3.	Medid	as cualitativas	35
		4.3.1.	Emisión de la llama a 800 nm y 660 nm	35
		4.3.2.	Emisión espontánea de radicales CH [*]	37
	4.4.	Medid	as cuantitativas	37
		4.4.1.	Atenuación del láser en el camino óptico	37
		4.4.2.	Radiación	39
5.	Pre	sentaci	ón y análisis de resultados	41
	5.1.	Llama	de difusión normal	41
		5.1.1.	Altura de llama	41
		5.1.2.	Temperatura y fracción en volumen de hollín	42
		5.1.3.	Radiación	44
	5.2.	Llama	de difusión inversa	45
		5.2.1.	Altura de llama	46
		5.2.2.	Fracción en volumen de hollín	47
		5.2.3.	Temperatura del hollín	53
		5.2.4.	Tiempo de residencia	56

5.2.5. Radiación	 58
6. Conclusiones	60
Bibliografía	63

Índice de ilustraciones

2.1.	Distribución de la capacidad instalada en Chile al 2010.	5
2.2.	Micrografía electrónica de partículas de hollín de tamaño medio de 200Å. \ldots .	6
2.3.	Esquema de la formación del hollín.	7
2.4.	Forma general de llamas de difusión según su cantidad de aire	9
2.5.	Flujos de combustible al punto de humo para distintos OI	11
2.6.	Esquema de un quemador inverso.	12
2.7.	Tipos de llama generadas en un quemador inverso	13
3.1.	Esquema de la discretización de la llama axisimétrica para utilizar el procedimiento de deconvolución de Onion-Peeling	18
3.2.	Esquema de la curva L.	21
3.3.	 (a) Función de prueba para una llama en función de la posición radial normalizada. (b) Datos integrados a través del camino óptico y (c) los mismos datos con ruido aleatorio de media 0 y desviación estándar de 0.05. (d)Reconstrucción de los datos con y sin regularización de Tikhonov. 	23
3.4.	Temperatura en función del radio para una llama de etileno a 21 % de oxígeno a una altura de 30 mm sobre el quemador.	27
4.1.	Esquema de la instalación experimental	31
4.2.	Imagen de una llama inversa típica generada en el laboratorio.	34
4.3.	Esquema de la emisión de la llama hasta ser capturada por la cámara	35
4.4.	Imágenes de emisión de una llama inversa a 37 $\%$ de OI, en unidades arbitrarias. $$.	36
4.5.	Ejemplo del método de segmentación de Ko aplicado a una llama normal de etileno a 21 % de OI	37

4.6.	Esquema de las intensidades del láser para las distintas condiciones. $\ldots\ldots\ldots\ldots$	38
4.7.	Intensidades recogidas por la cámara.	39
4.8.	Mapa 2D del espesor óptico de una llama inversa con un OI de 37 %	39
5.1.	Altura de la llama normal de etileno en función del OI.	42
5.2.	Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín y temperatura OIs de (a) 25% , (b) 31% y (c) 37% en una llama normal de etileno	43
5.3.	(a) Fracción en volumen de hollín integrada para las distintas alturas normalizadas sobre el quemador y (b) fracción en volumen de hollín integrada máxima como función del OI.	44
5.4.	Radiación emitida por la llama en función del OI	45
5.5.	Altura luminosa y de la zona de reacción para una llama inversa a 37% de OI. $~.~.$	46
5.6.	Altura luminosa y de la zona de reacción para las distintas llamas analizadas	47
5.7.	Grosor óptico para llamas inversas a distintos OI	48
5.8.	Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín para las distintas condiciones expe- rimentales.	50
5.9.	Curvas de (a) fracción en volumen de hollín integrada y (b) máximo β en función del OI con la altura sobre el quemador donde ocurre ese máximo	52
5.10.	Pendientes de β para cuantificar tasas de oxidación y formación, en función del índice de oxígeno.	53
5.11.	Perfiles radiales de temperatura del hollín para las distintas condiciones experimentales.	55
5.12.	Curvas de error (a) absoluto y (b) relativo para el cálculo de la temperatura del hollín.	56
5.13.	Tiempo de residencia de una partícula calculado en base a la altura de la zona de reacción y la zona luminosa	57
5.14.	(a) Distribución vertical del flujo radiativo en función de la altura sobre el quemadory (b) fracción radiativa de la llama como función del OI.	58

Nomenclatura

α	Parámetro de regularización
β	Fracción en volumen de hollín integrada
χ_r	Fracción radiativa
κ_λ	Coeficiente de absorción espectral
λ	Longitud de onda
Φ_{global}	Relación de equivalencia global
τ	Fracción de luz transmitida
C_1	Primera constante de Planck
C_2	Segunda constante de Planck
C_{λ}	Función de absorción
f(r)	Variable de campo local
f_s	Fracción en volumen de hollín
H_f	Altura de la llama
HAB	Altura sobre el quemador
HRR	Tasa de liberación de calor asumiendo combustión completa
I_λ^{bb}	Intensidad de cuerpo negro
J_{λ}	Emisión de la llama a longitud de ond a λ
k	Parte imaginaria del índice de refracción del hollín
L	Camino óptico
LHV	Poder calorífico inferior

Ν	Número de elementos discretos				
n	Parte real del índice de refracción del hollín				
OP	Onion-Peeling				
Р	Datos proyectados				
PTR	Potencia total radiativa				
$q^{\prime\prime}$	Flujo radiativo por unidad de área				
R	Radio de la llama				
r	Coordenada radial				
Re	Número de Reynolds				
Т	Temperatura del hollín				
T_{ad}	Temperatura de llama adiabática				
t_{res}	Tiempo de residencia				
V_f	Velocidad del combustible a la salida del quemador				
V_{ox}	Velocidad del oxidante				
Y_{ox}	Fracción másica a la estequiometría del oxidante				
z	Coordenada en dirección del eje de la llama				
a	Aceleración de flotabilidad				
Fr	Número de Froude				
IDF	Llama de difusión inversa				
NDF	Llama de difusión normal				
OI	Índice de oxígeno				

Capítulo 1

Introducción

El presente estudio se enmarca dentro del trabajo de titulación para optar al grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería, Mención Mecánica y como memoria para optar al título de Ingeniero Civil Mecánico y además en el contexto del proyecto *FONDECYT* 1130627 que se centra en la investigación de la producción de hollín en llamas de difusión laminar y sus aplicaciones en el uso de combustibles no convencionales. En el caso particular de esta investigación se estudian llamas de difusión laminar inversas¹ generadas a partir del combustible etileno (C_2H_4) que es uno de los tantos combustibles que se obtiene de la pirólisis de biomasa vegetal, recurso que ha demostrado ser una fuente de energía de bajo costo y alta disponibilidad en el país.

La combustión es un proceso que se ha estudiado desde hace bastantes años, sin embargo, debido a lo complejo de su naturaleza, todavía no se ha conseguido un entendimiento total del fenómeno. Esta complejidad viene dada por un lado debido a la gran cantidad de procesos involucrados de diferentes áreas de la física como la termodinámica, transferencia de calor, mecánica de fluidos y reacciones químicas entre otros, además de la complejidad intrínseca de cada uno de éstos. Algunos de ellos como la descomposición química del combustible dependen del transporte de especies gaseosas, la combinación y oxidación de especies reactivas, la producción de energía y calor y la radiación en retorno sobre el combustible. Todo lo anterior es responsable directo además de la formación de contaminantes en la combustión.

Uno de los principales productos de la combustión de hidrocarburos es el hollín, partículas sólidas compuestas principalmente por carbono. Dependiendo de las condiciones de la llama, el hollín puede no ser consumido completamente dentro de ésta y ser liberado al ambiente, lo que ha sido reconocido como un factor que contribuye tanto al cambio climático local como global y además como un agente determinante en la estimulación de serias enfermedades pulmonares [1–3]. Algunos precursores de la formación del hollín como los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH)² además han sido reconocidos como agentes cancerígenos [4]. Por otro lado, el hollín es un factor que contribuye de

¹Una llama de difusión laminar inversa es una llama en la cual la configuración de la inyección de combustible y aire es inversa a su contraparte normal, o sea, el combustible fluye por la parte exterior de la llama y el aire por la parte interior.

²Del inglés Polycyclic Aromatic Hidrocarbons.

manera importante a la rápida propagación de incendios accidentales a través de la transferencia de calor por radiación [5]. Por todo lo anterior es que se necesitan modelos precisos que simulen el fenómeno de formación del hollín para predecirlo y controlarlo. Para validar estos modelos se requieren resultados experimentales.

La producción de hollín en una llama de difusión laminar está dada por una cadena de procesos donde existe una competición entre dos fenómenos, uno de formación y otro de oxidación. Estos fenómenos pueden ser desacoplados a través del estudio de las llamas de difusión inversas $(IDF)^3$, debido a que se emite una gran cantidad de hollín sin oxidar dada la naturaleza misma de la llama, por lo que se pueden estudiar las partículas de hollín cerca de su estado de formación.

Teniendo en cuenta lo anterior, en la presente investigación se desarrolla un estudio de la combustión de uno de los gases que se puede obtener de la pirólisis de la biomasa utilizando un quemador axisimétrico para generar una llama de difusión laminar inversa. El análisis de esta llama se lleva a cabo a través de diagnósticos ópticos no intrusivos utilizando la metodología de Absorción/Emisión Modulada $(MAE)^4$ [6] para obtener la fracción en volumen de hollín y el campo de temperatura bajo distintas condiciones experimentales. También se desarrollan otras rutinas computacionales para la obtención de la radiación y altura de llama.

1.1. Objetivo General

El objetivo principal del presente estudio es evaluar los efectos del índice de oxígeno sobre las propiedades de una llama de difusión laminar inversa en flujo co-corriente en términos de la altura de llama, producción de hollín, temperatura y radiación, utilizando combustibles representativos de la pirólisis de biomasa (en este caso etileno).

1.2. Objetivos Específicos

- 1. Diseñar e implementar la instalación experimental en el espacio proporcionado por la UTFSM.
- 2. Desarrollar la teoría necesaria para el cálculo de la fracción en volumen y temperatura del hollín mediante diagnósticos ópticos no intrusivos.
- 3. Implementar la teoría en la plataforma computacional MatLab y verificar el buen funcionamiento de los programas desarrollados.
- 4. Determinar las condiciones experimentales a utilizar y realizar campañas de laboratorio en la instalación diseñada para medir las distintas cantidades requeridas variando la concentración

 $^{^{3}\}mathrm{Del}$ inglés Inverse Diffusion Flame.

⁴Del inglés Modulated Absorption Emission.

de oxígeno en el oxidante.

5. Cuantificar la precisión en la toma de datos mediante un análisis de error para cada cantidad.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Biomasa

Las fuentes de energía renovable más familiares para la mayoría de la población son la energía solar y eólica. Sin embargo, la biomasa contribuye de manera importante y puede ser una oportunidad real para usar en nuestro país cuando es tratada correctamente. En el territorio nacional se ha comprobado que existe una gran disponibilidad de este recurso renovable que podría ser utilizado en los próximos años. Por lo anterior es que se debe poner énfasis en el desarrollo de tecnologías que aprovechen esta fuente de energía en el país para diversificar y robustecer la matriz energética nacional.

La biomasa tal como madera, ramas de árboles, aserrín, etc. ha sido utilizada desde la antigüedad siendo probablemente una de las primeras fuentes de energía conocidas por el hombre, usándose por ejemplo para obtener calor y cocinar. En la actualidad, la forma más común para obtener energía a partir de la biomasa es quemarla para obtener calor. Este calor se puede utilizar directamente en procesos industriales o indirectamente para generar energía eléctrica. También se pueden obtener gases combustibles a través de la pirólisis de la biomasa, proceso de descomposición química debido al calentamiento del material mediante el cual se liberan los gases como etileno, metano, propano y otros del sólido. Otras formas de obtener biocombustibles a partir de la biomasa son su descomposición química o bioquímica. De cualquier forma, se debe liberar la energía química latente del combustible sólido o de los gases combustibles mediante el proceso de combustión.

En la actualidad, la capacidad energética instalada en Chile es de aproximadamente 15 GW [7] donde la mayor parte es aportada por la energía hidráulica y se distribuye como muestra en la Figura 2.1. De aquí se puede observar que la potencia aportada por la biomasa a la matriz es cercana a 150 MW. Sin embargo, según un estudio realizado por la Comisión Nacional de Energía [8], en el país existe un potencial total factible instalable de 470 MW como máximo y 310 MW como mínimo, obtenidos de residuos del manejo forestal en Chile, por lo que la explotación de este recurso podría duplicar o triplicar el aporte de esta fuente de energía.



Figura 2.1: Distribución de la capacidad instalada en Chile al 2010. [7]

Como se mencionó anteriormente, la biomasa puede ser quemada para obtener calor directamente o se pueden obtener gases combustibles a través del proceso de gasificación, que posteriormente se pueden utilizar para generar energía. El proceso de gasificación se compone de un conjunto de reacciones termoquímicas que se producen en un ambiente pobre en oxígeno y que da como resultado una serie de gases combustibles que luego pueden usarse en calderas, turbinas a gas o motores. En el proceso de gasificación se encuentra la pirólisis donde, por efecto del calor y en ausencia del medio oxidante, la materia orgánica sufre una descomposición físico-química. Como producto se obtienen gases, líquidos y residuo carbonoso cuyas cantidades dependen de las propiedades del material de partida y de las condiciones en que se realiza la pirólisis. Entre los gases que se obtienen como producto se encuentran metano, etileno, propano y butano entre otros hidrocarburos, donde en el proceso de combustión cada uno de estos gases sufre cambios químicos y cadenas de reacciones que los van descomponiendo en radicales más simples que conllevan a la formación, en primer lugar de PAH (que según la literatura son precursores en la formación de hollín) y luego de hollín. Es por lo anterior que interesa estudiar estos combustibles representativos de la combustión de biomasa y comprender cómo las condiciones de la reacción afectan a la producción de energía y la liberación de material particulado como el hollín.

2.2. Hollín

El hollín es en su mayor parte carbono, con presencia de otros elementos como oxígeno e hidrógeno pero en pequeñas cantidades [9]. Es producido durante la pirólisis a alta temperatura o la combustión de hidrocarburos. La emisión de hollín hacia el medio ambiente desde algún combustor o llama está determinado por la competencia entre los procesos de formación y oxidación. Esta emisión es reconocida como un factor de contaminación y de riesgo para la salud, además, en ciertas aplicaciones como en centrales eléctricas, puede afectar la vida útil de los álabes de turbinas a gas. Sin embargo, a veces es requerido generar la máxima cantidad de hollín para favorecer los mecanismos de transferencia de calor por radiación, pero estas partículas deben ser oxidadas por completo en el proceso de combustión para que se aproveche en la propia combustión y no sean emitidas al ambiente. A continuación se hace una pequeña revisión sobre las características del hollín junto a los procesos de formación que sufre éste durante el fenómeno de combustión.

2.2.1. Características

Las características del hollín están bien descritas en el trabajo de Palmer y Cullis [10]. Respecto a la composición, el carbono formado en las llamas contiene generalmente al menos un 1% en peso de hidrógeno. Cuando se examina una muestra de hollín en un microscopio electrónico, éste parece consistir en un número de partículas aproximadamente esféricas entrelazadas entre sí. Los diámetros de estas partículas varían desde 100 a 2000 Å y por lo general se encuentran entre 100 y 500 Å. Las partículas más pequeñas se encuentran en llamas que no generan hollín y las más grandes en llamas que generan mucho hollín. La difracción de rayos X muestra que cada partícula está hecha de un gran número de granos. Cada grano consiste en 5-10 capas de átomos de carbono, cada una conteniendo aproximadamente 100 átomos de carbono. La Figura 2.2 muestra un ejemplo de imagen de partículas de hollín bajo el microscopio electrónico donde se pueden observar claramente las aglomeraciones de partículas.



Figura 2.2: Micrografía electrónica de partículas de hollín de tamaño medio de 200Å.

[4]

2.2.2. Mecanismos de formación

La producción de partículas de hollín en una llama es un fenómeno controlado químicamente. Los hidrocarburos gaseosos livianos son convertidos en carbono sólido en pocos milisegundos [9]. La termodinámica no puede explicar este proceso por si misma debido a que el hollín es formado en regímenes más allá de donde es termodinámicamente estable en comparación a los óxidos de carbono, es por esto que la cinética química juega un rol fundamental en la producción del hollín. En la formación del hollín se han identificado distintas etapas como la creación de partículas, crecimiento de superficie y una posterior oxidación. Un esquema de estas etapas se muestra en la Figura 2.3.



Figura 2.3: Esquema de la formación del hollín.

[11]

La primera etapa es la creación de partículas, mediante la cual las primeras fases de material condensado surgen de las moléculas de combustible a través de su oxidación y/o productos de la pirólisis. Estos productos incluyen varios hidrocarburos no saturados, como acetileno y sus análogos superiores, ademas de PAHs. Estas especies son relativamente estables cinemáticamente respecto a parafinas y grupos alquenos. Estos dos tipos de moléculas son considerados los precursores más probables del hollín en llamas. La condensación de las fases gaseosas llevan a la aparición de las primera partículas reconocibles de hollín. Estas partículas son muy pequeñas, menores a 20 Å de diámetro, y la formación de un gran número de ellas no produce un aumento significativo en la concentración de hollín en la región de su formación, la cual generalmente está ubicada en la vecindad de la zona de reacción primaria.

El crecimiento de superficie es la etapa en la cual se genera la mayor parte del material en fase sólida. Esta etapa involucra la adhesión de especies en fase gaseosa a la superficie de las partículas y su incorporación a la fase sólida. Los combustibles gaseosos generalmente tienen un fracción molar de hidrógeno (≥ 0.5) mayor que la fase sólida a formar (0.1 - 0.2) por lo que se necesita que se condensen especies con la cantidad correcta de hidrógeno o que tengan una cantidad de hidrógeno mayor y luego pasar por un proceso de des-hidrogenación. Las reacciones de crecimiento de superficie producen un incremento en la fracción en volumen de hollín pero la cantidad de partículas se mantiene constante en el proceso. Lo contrario sucede en la etapa de coagulación, donde las partículas chocan y coalescen, por lo tanto disminuye el número de partículas pero se mantiene constante la fracción en volumen de hollín. El crecimiento de las partículas, o sea aumentar el diámetro de éstas, es el resultado del crecimiento de superficie y de la coagulación simultáneamente.

Las etapas mencionadas anteriormente de generación de partículas y su crecimiento constituyen los procesos de formación del hollín. Esto generalmente es seguido por un proceso de oxidación, en el cual el hollín es quemado en presencia de especies oxidativas como radicales OH^{*} u oxígeno para formar productos gaseosos como CO y CO₂. La emisión de hollín desde cualquier proceso de combustión depende del balance entre los procesos de formación y oxidación de éste.

2.3. Llamas de difusión laminar

Una llama de difusión es una llama en la cual el combustible y el oxidante inicialmente se encuentran separados y difunden hacia una zona de reacción desde lados opuestos de la llama. La velocidad de la combustión está dada por la velocidad con que los gases frescos se aproximan a la zona de combustión, la que depende de la naturaleza de cada combustible. Este tipo de llamas son las más frecuentes en la naturaleza; ejemplos de éstas son la llama de una vela, las generadas en quemadores industriales o las que se presentan en incendios forestales.

Las llamas de difusión se presentan en dos formas básicas: laminares o turbulentas. Las llamas laminares se generan cuando las velocidades (o números de Reynolds) del combustible y oxidante son lo suficiente pequeñas para que no se presente turbulencia. La ventaja que tienen es que son bastante estables y homogéneas por lo que se facilita su estudio en términos académicos. Sin embargo, en el común de los casos y en la mayoría de aplicaciones prácticas, las llamas que se generan son del tipo turbulenta [12], donde las velocidades son más altas que en llamas laminares, generando inestabilidades en la combustión. Desafortunadamente, es difícil estudiar en detalle una llama turbulenta debido a su inestabilidad, no homogeneidad y distorsión, por lo tanto, el estudio de llamas laminares se usa para analizar e interpretar las propiedades de una llama turbulenta como un conjunto de pequeñas y estables llamas laminares discretas llamadas Flamelets. Este apronte permite que el estudio de llamas laminares sea útil para inferir y comprender la naturaleza de las llamas turbulentas. A continuación se hace una revisión de lo que son las llamas de difusión laminares, de los distintos estudios que se han realizado y la importancia que tiene el análisis de éstas.

2.3.1. Llamas de difusión normales

Anteriormente ya se ha explicado lo que es una llama de difusión. En adelante se mencionarán los términos de llamas de difusión normales (NDF por *normal diffusion flame*) y llamas de difusión inversa (IDF por *inverse diffusion flame*). Una NDF es una llama de difusión que se genera en el laboratorio en un quemador co-anular. Por el tubo central del quemador fluye algún combustible a una cierta velocidad, y por el anillo exterior se mueve el oxidante. Generalmente existe mucho más aire que combustible en esta configuración, por lo que la combustión en esos casos está controlada por la cantidad de combustible, ya que éste se consume completamente. También puede ocurrir que exista menos aire del necesario para la combustión completa. Según la cantidad de aire en la configuración, una llama puede estar con exceso o déficit de aire, lo que determina su forma general [14] como se muestra en la Figura 2.4. Cuando existe exceso de aire, la forma de la llama es alargada y con su punta cerrada. Al contrario, cuando la combustión se realiza en déficit de aire, la forma de la llama es aproximadamente cónica y abierta.

Los estudios sobre NDF laminares son extensos. Entre estos una de las características importantes que se analiza es la tendencia a generar hollín de la llama y los efectos de distintos parámetros como la temperatura, tipo de combustible, presión y otros sobre esta tendencia. En términos de la composición del combustible, Schalla *et al.* [15,16] observaron la tendencia general a generar hollín, donde encontraron que los hidrocarburos aromáticos son los que presentan la mayor tendencia, seguidos por los alquinos, alquenos y finalmente los grupos alcanos.



Figura 2.4: Forma general de llamas de difusión según su cantidad de aire.

[14]

Milliken [17] encontró que en llamas de premezcla, entre más fría se encuentra la llama, mayor es su

tendencia a generar hollín. Esto se explica evaluando el efecto de la temperatura sobre dos procesos que compiten: la tasa de pirólisis del combustible intermediario (acetileno) que lleva a la formación de precursores y la tasa del ataque oxidativo del radical OH sobre estos precursores. Ambas tasas aumentan con la temperatura pero la tasa de oxidación aumenta más rápido, por lo tanto, a mayor temperatura existe una menor tendencia a generar hollín en llamas de premezcla. Este concepto introducido por Milliken se extendió [18] para mostrar que en llamas de difusión, donde no existe un ataque oxidativo sobre los precursores, mientras más alta es la temperatura mayor es la tasa de pirólisis y la formación de precursores, y por lo tanto la tasa de formación de hollín.

La temperatura junto con el tiempo de residencia son las propiedades fisicas más importantes que afectan la formación de hollín en una llama de difusión [4, 18]. Se ha encontrado también que en NDFs, a medida que se aumenta la presión total del sistema aumenta la formación de hollín [19], pero no se tiene claro si el incremento en la tasa de pirólisis y en la formación de hollín se debe a que la presión aumenta la temperatura de la llama y/o los niveles de concentración o afecta directamente la estructura de la llama.

El efecto de la composición del oxidante sobre la tendencia a generar hollín en llamas de difusión fue estudiado por primera vez por McLintock [20] quien determinó el flujo de combustible en que el combustible comenzaba a liberar hollín¹, parámetro que da una medida de la tendencia del combustible a generar hollín para una condición dada. Para esto generó llamas de etileno en un quemador co-anular y utilizó distintas composiciones del oxidante. La composición fue caracterizada por su índice de oxígeno (OI por oxygen index), OI = flujo de oxígeno/(flujo de oxígeno + flujo de inerte). En el estudio no se encontró gran diferencia al utilizar distintos inertes para diluir el oxidante y la tendencia general para todos en el rango de estudio (0.1 < OI < 0.4) fue que la disminución del OI conlleva a una pequeña disminución en la tendencia a generar hollín. Glassman v Yaccarino [21] extendieron el estudio investigando experimentalmente la influencia del OI en las características al punto de humo para distintos combustibles como etileno y butano, donde describieron cuantitativamente la influencia de este parámetro sobre la altura de la llama y la relación con la temperatura de la llama. Encontraron que a medida que se aumenta el OI desde valores bajos, el flujo de combustible al punto de humo comienza a aumentar hasta alcanzar un máximo aproximadamente para un 24%, como se muestra en la Figura 2.5. Los cambios en el OI los lograron de 3 formas distintas: manteniendo el flujo total constante y variando el oxígeno e inerte, variando sólo el inerte y variando sólo el oxígeno; sin encontrar cambios en la tendencia para las 3 opciones.

¹El punto en el que un combustible comienza a liberar hollín es llamado en inglés *Smoke Point* o punto de humo y la altura de la llama en esta condición se conoce como *Smoke Height* o altura de humo.



Figura 2.5: Flujos de combustible al punto de humo para distintos OI. [21]

Por último, estudiaron también el efecto de utilizar distintos inertes en la dilución del oxidante, tales como Argón y Nitrógeno, y encontraron que la curva mostrada en la Figura 2.5 se desplaza horizontalmente debido a las distintas temperaturas que se alcanzan en la llama para los distintos gases inertes utilizados.

2.3.2. Llamas de difusión inversas

Al igual que las llamas normales, una IDF es una llama de difusión generada en el laboratorio en un quemador de tubos concéntricos. La diferencia de estas llamas con las NDF es que en este caso la inyección de combustible y aire están intercambiados: en el tubo central fluye aire y en el externo combustible. Debido a que el combustible se mueve por el exterior del aire, existe una tercera sección por donde fluye algún gas inerte, generalmente Nitrógeno, para evitar que se formen llamas secundarias con el aire presente en el medio ambiente. La configuración de un quemador inverso se ve representada en la Figura 2.6. Debido a esta configuración, generalmente la cantidad de combustible es mucho mayor a la necesaria para la combustión estequiométrica, lo que hace que en este tipo de quemador se generen llamas sub-ventiladas, y por lo mismo la combustión está controlada por la cantidad de aire que es el que se consume por completo.

Como se detalló en la sección anterior, la literatura sobre NDF es bastante extensa y existen numerosos estudios sobre éstas, sin embargo, los estudios sobre llamas en condiciones de sub-ventilación es bastante limitada, al igual que los estudios realizados sobre IDF [22].



Figura 2.6: Esquema de un quemador inverso.

Como se mencionó, en una IDF el combustible fluye rodeando el aire. Como el hollín se forma en la zona del combustible en llamas de difusión [23,24], en IDF el hollín se forma por el lado externo de la llama, por lo tanto, el hollín escapa sin ser oxidado por completo de la llama debido a que nunca pasa a las zonas interiores de alta temperatura; al contrario, el hollín se mueve hacia zonas exteriores que están a menores temperaturas [18,25]. Este hollín sin ser oxidado completamente es similar al generado en NDF con poca ventilación y puede ayudar al estudio de la estructura del hollín en etapas tempranas de su formación. Es por lo anterior que una IDF es una llama con capacidad de emitir gran cantidad de hollín al medio ambiente, similar al de NDF sub-ventiladas.

La introducción del concepto de llama de difusión inversa se remonta a los años 20, cuando Friend la mencionó por primera vez en su trabajo [26] y luego Burke y Schumann [27] reportaron haber medido alturas de algunas IDF pero sin dar detalles. Luego existieron algunos pocos estudios [28–31] pero en ninguno se enfatizaron los detalles de la estructura de este tipo de llama ni se estudiaron en profundidad.

Recientemente se han estudiado más este tipo de llamas. Wu y Essenhigh [32] hicieron un mapa donde caracterizaron distintos tipos de llamas dependiendo de las velocidades de aire y combustible utilizadas en los experimentos, identificando 6 tipos distintos para metano como combustible utilizado. Más adelante Lee *et al.* [33] identificaron un mapa similar para llamas de etileno, agregando 3 tipos más de llama. Un esquema del mapa encontrado en estos dos estudios se puede observar en la Figura 2.7.



Figura 2.7: Tipos de llama generadas en un quemador inverso.

Este mapa es bastante importante porque permite identificar qué tipos de llama se tiene según las velocidades de los gases. La línea que separa las zonas I, II y III de la IV, V y VI (identificadas por [32]) es la velocidad de combustible a la cual las llamas comienzan a ser estables. La forma de las llamas tipo I y IV se parecen a llamas de un quemador Bunsen y se observa una pequeña y tenue región amarilla, representando el hollín, en la punta de la llama. Los tipos II y V poseen una zona más ancha de hollín y ésta se extiende hasta aproximadamente la mitad del ancho de la llama. En los tipos III y VI se observan claras llamas amarillas que se superponen a la zona azul de reacción de la llama y no cambia la altura ni la forma de la llama a medida que se aumenta la velocidad del combustible. Entre las llamas inestables, el tipo VII muestra una llama amarilla parpadeante en la dirección axial y la llama azul del tipo VIII es elongada más allá de la región amarilla. El tipo IX muestra una llama residual dentro de la boquilla del quemador. En el mapa también se puede apreciar la línea estequiométrica que es la línea que representa las cantidades de aire y combustible para que se produzca una reacción a la estequiometría. El tipo de llama más representativo para las IDF es el III [32] que forma y libera suficiente hollín para ser apreciado en los diagnósticos y para eventualmente recolectarlo para analizar su estructura y además es estable, por lo tanto se busca generar ese tipo de llama en el laboratorio para su análisis. Dado el mapa, la zona III está siempre por sobre la relación de equivalencia, por lo tanto en esos casos la combustión siempre sucede en déficit de aire.

Kaplan y Kaisalanath [34] realizaron simulaciones numéricas directas para observar los efectos de la variación del cociente de velocidad entre aire y combustible para NDFs y luego compararon una NDF con una IDF con las mismas velocidades de aire y combustible. Ellos encontraron que con las mismas condiciones una IDF produce mucho menos hollín que una NDF debido a que la tasa de crecimiento de superficie del hollín es menor porque la temperatura y las condiciones estequiométricas son desfavorables para la formación del hollín. Además, las llamas inversas liberan hollín debido a que el crecimiento de superficie continúa después que la oxidación termina, al contrario que en llamas

normales donde se encontró que ambos procesos cesan aproximadamente al mismo tiempo. Por último encontraron que en términos de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno de combustión en ambos tipos de llamas no hay diferencias y las simulaciones computacionales se llevaron a cabo de la misma forma en ambos casos.

Blevins *et al.* [35] realizaron experimentos para comprobar la hipótesis que el hollín obtenido de IDFs es similar a las partículas precursoras de hollín y al hollín que se libera en llamas sub-ventiladas. Para esto recolectaron hollín de llamas inversas de etileno y analizaron su morfología y contenido de diversas especies. Los resultados que obtuvieron indican que la hipótesis era correcta y se puede encontrar grandes cantidades de hollín joven a partir de una IDF sin invadir la llama.

Mikofski *et al.* analizaron la estructura [22] y la altura [36] de IDFs de etileno y metano con distintos flujos de aire. Respecto a la estructura, estudiaron cuantitativamente la temperatura y cualitativamente las concentraciones de hollín, PAH y radicales OH* para entender los mecanismos de formación de hollín en este tipo de llama, encontrando que son similares a los mecanismos que ocurren en NDFs. También estudiaron la altura de la llama al variar el flujo de aire, encontrando que la altura de la zona luminosa era más alta que la zona de reacción. Además compararon la altura de la zona de reacción con las obtenidas a partir de la teoría de Roper para quemadores co-anulares [37, 38] y encontraron buena concordancia entre lo obtenido experimentalmente y lo predicho por la teoría. El hecho que el análisis de Roper funcione de buena forma con IDFs se toma como evidencia de que estas llamas son similares en estructura a las NDFs.

Macko *et al.* [39] realizó mediciones de extinción en una IDF para determinar las concentraciones de hollín en la llama. Estas mediciones se realizan con frecuencia en NDFs pero no se habían aplicado a IDFs. Mediante el estudio encontraron que las magnitudes de las cantidades de hollín en IDFs es aproximadamente un orden de magnitud menor que en NDFs debido a que el hollín formado en IDFs se mueve hacia zonas externas y más frías de la llama por lo que no se expone a las altas temperaturas necesarias para crecer.

Recientemente Jung *et al.* [40] estudiaron los efectos del enriquecimiento con oxígeno en llamas de difusión inversas. Para esto aumentaron la composición del oxidante desde 21 % hasta 40 % de oxígeno y estudiaron la altura de la zona de reacción de la llama, la temperatura de la llama y cualitativamente las zonas de existencia de PAHs y de hollín. Además obtuvieron la razón entre carbono e hidrógeno² a través del análisis de muestras de hollín para evaluar su grado de carbonización. Por último, analizaron la morfología del hollín observando las muestras por Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM). A través del estudio encontraron que la altura de la zona de reacción de la llama disminuye levemente a medida que se aumente el índice de oxígeno. Respecto a los PAHs y al hollín encontraron que los pequeños PAHs producidos debido a la pirólisis del combustible pueden moverse lejos aguas abajo y crecer para formar grandes PAHs y hollín siempre que la temperatura se mantenga lo suficientemente alta para generar partículas de hollín. La temperatura aparente del

 $^{^{2}(}C/H)$ ratio

hollín se mantuvo entre 2000 y 2200 K bajo la altura de la zona de reacción de la llama sin importar la fracción de oxígeno. Más allá de la altura de la llama la temperatura del hollín se mantuvo sobre los 1600 K. Respecto al grado de carbonización, encontraron que éste aumentaba a medida que el tiempo de residencia aumenta con cada condición enriquecida en oxígeno. Por último, las micrografías tomadas con TEM mostraron que el hollín joven pueden tener grandes grupos de partículas principalmente compuestas por condensación de PAHs y su crecimiento de superficie, sin embargo el hollín maduro se forma como agregados.

Capítulo 3

Marco teórico

En el presente capítulo se desarrolla el modelo teórico que se utiliza para obtener la fracción en volumen de hollín, la temperatura del hollín en la llama y se detalla el procedimiento para determinar la forma y la altura de la llama. Por último se hace un análisis para cuantificar el error en cada una de las cantidades a determinar.

3.1. Fracción en volumen de hollín

Para obtener la fracción en volumen de hollín se utiliza la metodología propuesta por Jenkins y Hanson [6] que consiste principalmente en pulsar un láser de una determinada longitud de onda a una cierta frecuencia a través de una llama. Las cantidades que se registran por la cámara, en unidades arbitrarias, son las siguientes:

- 1. I_0 : intensidad registrada por la cámara con el láser encendido y la llama apagada.
- 2. S = I + J: intensidad registrada por la cámara con el láser encendido y la llama encendida.
- 3. S' = I' + J: intensidad registrada por la cámara con el láser apagado y la llama encendida.
- 4. I'_0 : intensidad registrada por la cámara con el láser apagado y la llama apagada.

donde $I \in I'$ son la intensidad del láser transmitida con el láser encendido y apagado, respectivamente.

La fracción de luz transmitida se puede definir como:

$$\tau = \frac{I}{I_0} \tag{3.1}$$

o alternativamente

$$\tau = \frac{I'}{I'_0} \tag{3.2}$$

Multiplicando el numerador y denominador de 3.1 por el factor $(1 - I'_0/I_0)$ y sustituyendo 3.2 por 3.1 en el numerador se obtiene:

$$\tau = \frac{I - I'}{I_0 - I'_0} \tag{3.3}$$

Se puede observar que el numerador de 3.3 es igual que el término (S - S'), por lo tanto, finalmente se obtiene:

$$\tau = \frac{S - S'}{I_0 - I'_0} \tag{3.4}$$

Todas las cantidades descritas anteriormente entregan información plana, es decir en dos dimensiones, a diferencia de una llama axisimétrica que es tridimensional, por lo tanto se deben utilizar técnicas para reconstruir la información integrada obtenida y así calcular perfiles radiales de la cantidad física en cuestión. Si se considera que las partículas de hollín son suficientemente pequeñas de tal manera de estar dentro del límite de tamaño de Rayleigh $(2\pi r < 0.3)$ la dispersión de las partículas puede ser despreciada, por lo tanto el coeficiente de extinción puede ser aproximado por el coeficiente de absorción [41]. Con esta consideración, la cantidad total τ puede ser relacionada con la cantidad local κ_{λ} (coeficiente de absorción espectral) de la siguiente forma:

$$-\ln(\tau) = \int_0^L \kappa_\lambda \ dl \tag{3.5}$$

donde L representa el camino óptico que recorre el haz de luz a través de la llama. Dada la ecuación 3.5 se puede calcular el coeficiente de absorción espectral en función de la posición radial de la llama. Además, la teoría de Mie muestra que dentro del límite de Rayleigh se puede relacionar el coeficiente de absorción espectral con la fracción en volumen de hollín realizando mediciones con una sola longitud de onda [42] de la siguiente forma:

$$f_s = \frac{\kappa_\lambda \lambda}{C_\lambda} \tag{3.6}$$

donde C_{λ} es la función de absorción y se calcula como:

$$C_{\lambda} = \frac{36\pi nk}{\left(n^2 - k^2 + 2\right)^2 + 4n^2k^2} \tag{3.7}$$

donde $n \ge k$ son la parte real e imaginaria del índice de refracción del hollín, que dependen de la longitud de onda y pueden calcularse según las correlaciones de Chang y Charalampopoulos [43].

Por lo tanto, es necesario calcular la cantidad κ_{λ} y para eso se utiliza el método de deconvolución de Onion-Peeling [44].

3.1.1. Deconvolución de Onion-Peeling

El método de deconvolución de Onion-Peeling se ha utilizado frecuentemente en este tipo de problemas debido a su conveniencia, ya que toma ventaja natural de la malla proporcionada por los pixeles de las imágenes obtenidas por la cámara. La Figura 3.1 muestra un esquema de este tipo de experimento donde el objetivo es determinar el coeficiente de absorción espectral $\kappa_{\lambda}(r)$ en base a mediciones de la cantidad de luz transmitida $\tau(y)$.



Figura 3.1: Esquema de la discretización de la llama axisimétrica para utilizar el procedimiento de deconvolución de Onion-Peeling.

Después de un análisis geométrico se puede mostrar que las mediciones de transmisión $P(y) = -\ln(\tau)$ (donde τ se calcula según la ecuación 3.4) están relacionadas con el coeficiente de absorción espectral $f(r) = \kappa_{\lambda}(r)$ como sigue:

$$P(y) = 2 \int_{y}^{R} \frac{f(r)r}{\sqrt{r^{2} - y^{2}}} dr$$
(3.8)

donde R es el radio de la llama. Esta es una forma de la ecuación integral de Abel y tiene la siguiente solución analítica conocida

$$f(r) = \frac{-1}{\pi} \int_{y}^{R} \frac{P'(y)}{\sqrt{y^2 - r^2}} \, dy \tag{3.9}$$

donde P'(y) = dP(y)/dy. Se han desarrollado varios métodos numéricos para resolver este tipo de

ecuaciones [44–46]. La mayoría de las técnicas pertenecen a dos tipos: los que resuelven directamente la ecuación 3.8 y los que trabajan con la ecuación 3.9. El método más simple y usado para trabajar con la ecuación 3.8 es el de Onion-Peeling [44] en el cual la llama se divide en N elementos anulares equiespaciados de ancho $\Delta r = R/(N - 1/2)$. Si la fracción en volumen de hollín, y por consiguiente el coeficiente de absorción espectral se consideran constantes en cada elemento, la ecuación 3.8 se puede discretizar y se transforma en:

$$P_{i} = 2 \sum_{j=1}^{N-1} f_{j} \int_{\substack{r_{i}, j = i \\ r_{j} - \Delta r/2, j > i}}^{r_{j} + \Delta r/2} \frac{r}{\sqrt{r^{2} - y_{i}^{2}}} dr$$
(3.10)

donde $y_i = i\Delta r$, $r_j = j\Delta r$, $P_i = P(y_i)$ y f_j aproxima a $\kappa_{\lambda}(r_j)$. Escribiendo la ecuación 3.10 para cada elemento anular se obtiene un sistema lineal de ecuaciones que puede ser escrito de forma matricial como:

$$\boldsymbol{A}_{OP}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3.11}$$

donde \boldsymbol{x} contiene las variables desconocidas, $\boldsymbol{x}^T = \{f_i, i = 0, 1, \dots, N-1\}$ y \boldsymbol{b} contiene los datos proyectados, $\boldsymbol{b}^T = \{P(r_i), i = 0, 1, \dots, N-1\}$. \boldsymbol{A}_{OP} es una matriz triangular superior compuesta por el largo de las cuerdas que se forman en la circunferencia de la llama axisimétrica para las distintas distancias y_i desde su centro. Esta matriz se determina considerando la geometría del problema [44–46]:

$$\mathbf{A}_{OP} = \begin{cases} 0 & j < i \\ 2\Delta r [(j+1/2)^2 - i^2]^{1/2} & j = i \\ 2\Delta r \left\{ [(j+1/2)^2 - i^2]^{1/2} - [(j-1/2)^2 - i^2]^{1/2} \right\} & j > i \end{cases}$$
(3.12)

Debido a que la matriz A_{OP} (desde ahora A para simplificar la notación) es triangular superior, se puede obtener fácilmente x por sustitución en reversa.

El problema que tiene este método es que la ecuación integral de Abel (3.8) está mal planteada¹ en el sentido que la solución de la ecuación (\boldsymbol{x}) es muy sensible a pequeñas perturbaciones en los datos (\boldsymbol{b}), es por este motivo que se utiliza un método de regularización de Tikhonov [44].

3.1.2. Regularización de Tikhonov

Como se menciona anteriormente, los problemas causados debido a la mala definición de la ecuación integral de Abel se pueden solventar utilizando técnicas de regularización. Estas técnicas generan

¹Se dice que un problema matemático está mal planteado (*ill-posed*) cuando no cumple la descripción de Hadamard [47] de un problema bien planteado. Para que un problema esté bien planteado debe tener solución, ésta debe ser única y debe ser una función continua de sus parámetros de entrada.

una secuencia de problemas bien planteados que aproximan la solución del problema original. Aunque existen varias técnicas de regularización distintas para tratar este tipo de problemas [48], la regularización de Tikhonov es apropiada para este tipo de aplicaciones [48,49].

Esta regularización se basa en la observación que la función cuadrática objetivo

$$F_1(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b}$$
(3.13)

se minimiza cuando \boldsymbol{x} satisface el sistema de ecuaciones lineales $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}$, debido a que $\nabla F_1(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b} = 0$ cuando $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^*$. Sin embargo, como la matriz \boldsymbol{A} está mal acondicionada (tiene filas que son casi linealmente dependientes), es difícil encontrar un mínimo global sobre el dominio de \boldsymbol{x} .

Para estabilizar la solución del sistema, se suma una función objetivo $F_2(\mathbf{x})$ a $F_1(\mathbf{x})$ definiendo una nueva función objetivo compuesta $F(\mathbf{x}) = F_1(\mathbf{x}) + F_2(\mathbf{x})$. La función $F_2(\mathbf{x})$ para regularizar la solución está definida como sigue:

$$F_2(\boldsymbol{x}) = \alpha \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{L}^T \boldsymbol{L} \boldsymbol{x} \tag{3.14}$$

donde L es una matriz de orden $(N \times N + 1)$ que aproxima el operador diferencial en el espacio discreto y α es un parámetro de regularización. En este caso se utiliza la regularización de Tikhonov de orden cero, donde el operador diferencial L está definido de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}_{N \times (N+1)}$$
(3.15)

Este operador ha funcionado bien cuando se trabaja con procesos donde domina la difusión y por lo tanto tienen soluciones naturalmente suaves, como es el caso de llamas laminares [45,46].

Al tener una columna más que el número de filas, la función $F_2(\boldsymbol{x})$ tiene el mismo problema que $F_1(\boldsymbol{x})$, sin embargo la suma de ambas funciones tiene un mínimo global bien definido $\tilde{\boldsymbol{x}}^*$ con lo que se soluciona el problema inicial. Este mínimo puede ser encontrado fijando $\nabla F_1(\tilde{\boldsymbol{x}}^*) + \nabla F_2(\tilde{\boldsymbol{x}}^*) = 0$ que es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones análogo a 3.11:

$$\boldsymbol{A}_{Tik}\tilde{\boldsymbol{x}}^* = \boldsymbol{b}_{Tik} \tag{3.16}$$

donde $A_{Tik} = (A^T A + \alpha L^T L)$ y $b_{Tik} = A^T b$. La solución de la ecuación 3.16 es un balance entre exactitud, minimizando $F_1(x)$, y suavidad de la solución, minimizando $F_2(x)$. Este balance está controlado por el parámetro de regularización α . Cuando se aumenta el valor de α se reduce la amplificación de las perturbaciones, por lo que se tiene una solución más suave, pero al mismo tiempo disminuye la influencia de la matriz original del problema lo que resulta en una exactitud menor de la solución. Por lo anterior es importante escoger un valor óptimo del parámetro de regularización α que sea lo suficientemente alto para estabilizar la solución debido a la amplificación de las perturbaciones, pero no tan alto como para que se pierda la influencia del problema original.

Elección del parámetro de regularización

La clave para que la regularización de Tikhonov entregue resultados confiables es la buena elección del parámetro de regularización. El valor óptimo de este parámetro α^* es tal que minimiza la suma del error debido al ruido en la señal y el error por la misma regularización. Una de las estrategias más recientes para seleccionar el parámetro de regularización es el criterio de la curva L (LCC)² propuesto por Hansen y O'Leary [50]. Para encontrar el parámetro de regularización óptimo a través de este criterio, se grafica la norma $||Lx_{\alpha}||_2$ versus la norma $||Ax_{\alpha} - b||_2$ que dan cuenta de la influencia de la regularización y de la exactitud de la solución, respectivamente. Esto se hace sobre un rango de posibles valores para α en escala logarítmica. Luego, las soluciones correspondientes a la parte vertical de la curva están dominadas mayormente por ruido (sin regularización) y aquellas en la parte horizontal de la curva están sobre regularizadas, por lo tanto, un punto en el que hay un buen balance entre el problema original y la regularización es en la esquina de la curva L. Esto se muestra esquemáticamente en la Figura 3.2.



Figura 3.2: Esquema de la curva L.

²Del inglés *L*-curve criterion.

La esquina de la curva L puede ser encontrada de diferentes formas, siendo la más simple graficar la curva e identificar la esquina por inspección [45], sin embargo, este método no puede ser usado para encontrar el parámetro óptimo automáticamente. Un método más riguroso consiste en calcular el punto de máxima curvatura de la curva L. La curvatura de la curva L, κ_{α} , se define como

$$\kappa_{\alpha} = \frac{\rho_{\alpha}' \eta_{\alpha}'' - \rho_{\alpha}'' \eta_{\alpha}'}{\left[(\rho_{\alpha}')^2 + (\eta_{\alpha}')^2\right]^{3/2}}$$
(3.17)

donde $\rho_{\alpha} = \log_{10}(||\mathbf{A}\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{b}||_2)$ y $\eta_{\alpha} = \log_{10}(||\mathbf{L}\mathbf{x}_{\alpha}||_2)$ y todas las derivadas son respecto a α . Para encontrar el punto de máxima curvatura se pueden aproximar las derivadas de primer y segundo orden usando diferencias finitas, sin embargo, la descomposición en valores propios generalizada (descrita en [48]) es una técnica más eficiente y apropiada para calcular estos valores. Estos algoritmos fueron implementados computacionalmente y se probaron para validar su buen funcionamiento. Para esto se utilizó un caso de prueba implementado anteriormente por Kashif *et al.* [51], donde la función de prueba es un polinomio que simula un perfil radial de fracción en volumen de hollín definido de la siguiente forma:

$$f(r) = a(r-\phi)^4 + b(r-\phi)^3 + c(r-\phi)^2 + d(r-\phi) + e$$

con los siguientes parámetros:

Tabla 3.1: Parámetros utilizados para la función de prueba.

Parámetros	a	b	с	d	e	ϕ
r < 0.702	0.186	-0.411	1.43	-2.631	1.509	-1.096
$r \ge 0.702$	-43.868	3.515	43.546	16.835	1.675	1.269

El procedimiento consiste en generar valores para la función de prueba, luego integrarlos a través del camino óptico, introducir ruido y a partir de los valores integrados con ruido reconstruir la función de prueba. Estos pasos se muestran en la Figura 3.3.

En este caso la Figura 3.3a representa el coeficiente de absorción espectral que es la cantidad local que se quiere calcular en cada punto dentro de la llama. La Figura 3.3b representa el análogo a la cantidad integrada que se obtiene, que para el cálculo de la fracción en volumen de hollín es la fracción de luz transmitida, τ . En la Figura 3.3d se puede observar la importancia de realizar la regularización de Tikhonov de buena forma ya que sin regularización la solución es irregular y muy sensible a las pequeñas perturbaciones que se le dan a los datos integrados. A pesar de esto, al utilizar la regularización se puede reconstruir la información sin grandes errores.



Figura 3.3: (a) Función de prueba para una llama en función de la posición radial normalizada. (b) Datos integrados a través del camino óptico y (c) los mismos datos con ruido aleatorio de media 0 y desviación estándar de 0.05.
(d)Reconstrucción de los datos con y sin regularización de Tikhonov.

Finalmente con todas estas consideraciones, explícitamente el coeficiente de absorción espectral se calcula como:

$$\kappa_{\lambda} = \boldsymbol{A}_{Tik}^{-1} \boldsymbol{b}_{Tik} \tag{3.18}$$

y mediante la ecuación 3.6 es posible obtener los perfiles de fracción en volumen de hollín deseados.

3.2. Temperatura del hollín

El cálculo de la temperatura del hollín sigue una lógica similar a la de la fracción en volumen de hollín: se debe pasar de información integrada a información local dentro de la llama. Para esto se utiliza el siguiente procedimiento midiendo la emisión de la llama a dos longitudes de onda, basado en el trabajo de Jenkins y Hanson [6]. La absorción y emisión (despreciando efectos de dispersión) de la radiación a través de una línea de visión por la llama es descrita por la siguiente ecuación de transferencia radiativa:

$$\frac{dI_{\lambda}}{dl} + \kappa_{\lambda}(l)I_{\lambda} = J_{\lambda}(l) \tag{3.19}$$

donde $J_{\lambda}(l) = \kappa_{\lambda}(l)I_{\lambda}^{bb}$ representa la emisión de la llama. La intensidad de cuerpo negro está dada por la ecuación de Planck.

$$I_{\lambda}^{bb}(T) = \frac{C_1}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{C_2}{\lambda T}\right) - 1\right)}$$
(3.20)

Donde $C_1=3.742 \ge 10^{-16} \text{ Wm}^2 \ge C_2=1.4385 \ge 10^{-2} \text{ mK}$. La solución de la ecuación de transferencia radiativa a través de una línea de visión está dada por la siguiente expresión:

$$I_{\lambda}(y) - I_{\lambda,0}(y)\tau_{\lambda}(y) = \int_{l_0(y)}^{l_1(y)} J_{\lambda}(l) \exp\left(-\int_l^{l_1(y)} \kappa(l')dl'\right) dl$$
(3.21)

para cada línea de visión que sigue la radiación atravesando una posición y en la llama, con τ_{λ} siendo la fracción de luz transmitida observada a una longitud de onda λ :

$$\tau_{\lambda} = \exp\left(-\int_{l_0(y)}^{l_1(y)} \kappa(l) dl\right)$$

y siendo $I_{0,\lambda}(y)$ la intensidad del laser. Los términos $l_1(y) = \sqrt{R^2 - y^2}$ y $l_0(y) = -\sqrt{R^2 - y^2}$ representan el final y el inicio del camino óptico, respectivamente, para una llama de radio R. El lado derecho de la ecuación 3.21 se puede expresar explícitamente en términos de la coordenada radial de la llama $r = \sqrt{l^2 + y^2}$ como:

$$I_{\lambda}(y) - I_{\lambda,0}(y)\tau_{\lambda}(y) = \int_{l_0(y)}^{l_1(y)} J_{\lambda}(\sqrt{l^2 + y^2}) \exp\left(-\int_{l}^{l_1(y)} \kappa(\sqrt{l'^2 + y^2}) dl'\right) dl$$
(3.22)

Cuando se considera solamente la emisión de la llama (con el láser apagado), el término $I_{0,\lambda}$ se

anula. En estos casos, la ecuación 3.22 puede ser discretizada como sigue, siguiendo el trabajo de Liu y Jiang [52]:

$$I_{\lambda}(y) = \sum_{i=1}^{N} \left[\kappa_{\lambda} \left(\sqrt{l_i^2 + y^2} \right) I_{\lambda}^{bb} \left(\sqrt{l_i^2 + y^2} \right) \exp\left(-\sum_{m=i+1}^{N} \kappa_{\lambda} \left(\sqrt{l_m^2 + y^2} \right) \Delta x \right) \Delta x \right]$$
(3.23)

donde N es el número de secciones uniformes (en términos de Δr) o anillos concéntricos para la discretización de la sección transversal de la llama. La temperatura (y por lo tanto el término I_{λ}^{bb}) es considerada como desconocida. La temperatura y el coeficiente de absorción se asumen constantes en cada uno de los anillos. Como la fracción en volumen de hollín $f_s(r)$ es una propiedad física (calculada como se detalla en la sección anterior) y por lo tanto independiente de la longitud de onda con que se mide, $\kappa_{\lambda}(r)$ puede ser evaluado según la ecuación 3.6 para distintas longitudes de onda. A partir de la geometría axisimétrica de la llama surgen las siguientes relaciones:

$$r_j = (j - 0.5)\Delta r$$
$$y_j = (j - 1)\Delta r$$
$$\Delta r = R/(N - 0.5)$$

que son las mismas relaciones geométricas que se utilizan en la discretización para el cálculo de la fracción en volumen de hollín. A través de algunas manipulaciones algebraicas, la ecuación 3.23 se puede reescribir como:

$$P_{j}(y) = \sum_{i=j+1}^{N} \left\{ I_{i}^{bb} \left[1 - \exp\left(-\kappa_{i} \Delta x_{i,j}\right)\right] \exp\left[-\sum_{m=j}^{i-1} \kappa_{m} \Delta x_{m,j} - \sum_{m=j+1}^{N} \kappa_{m} \Delta x_{m,j}\right] \right\} + \sum_{i=j}^{N} \left\{ I_{i}^{bb} \left[1 - \exp\left(-\kappa_{i} \Delta x_{i,j}\right)\right] \exp\left[-\sum_{m=i+1}^{N} \kappa_{m} \Delta x_{m,j}\right] \right\}$$
(3.24)

donde el sub-índice λ fue omitido por simplicidad y el lado izquierdo de la ecuación fue escrito como $P_j(y) = I_{\lambda}(y)$ para evitar confusiones. La ecuación 3.24 puede ser escrita en forma matricial como
$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, con la variable a determinar $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} I_1^{bb}, I_2^{bb}, ..., I_N^{bb} \end{bmatrix}^T$, $\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} P_1, P_2, ..., P_N \end{bmatrix}^T$ y

$$\boldsymbol{A} = \begin{cases} 0 & i < j \\ \left[1 - \exp\left(-\kappa_{i}\Delta x_{i,j}\right)\right] \exp\left[-\sum_{m=i+1}^{N}\kappa_{m}\Delta x_{m,j}\right] & i = j \\ \left[1 - \exp\left(-\kappa_{i}\Delta x_{i,j}\right)\right] \left\{ \exp\left[-\sum_{m=j}^{i-1}\kappa_{m}\Delta x_{m,j} - \sum_{m=j+1}^{N}\kappa_{m}\Delta x_{m,j}\right] & (3.25) \\ + \exp\left[-\sum_{m=i+1}^{N}\kappa_{m}\Delta x_{m,j}\right] \right\} & i > j \end{cases}$$

Se puede observar que la forma de resolver el problema tiene la misma lógica que en el caso de la fracción en volumen de hollín y se forman sistemas matriciales similares. Resolviendo el sistema de ecuaciones de obtiene x que es la distribución radial de la intensidad de cuerpo negro del hollín dentro de la llama. Este procedimiendo se puede aplicar a las intensidades P medidas a través del camino óptico para cualquier par de longitudes de onda. Una vez que las intensidades de cuerpo negro a dos longitudes de onda son obtenidas, la temperatura local del hollín puede ser derivada de su cuociente, siguiendo el trabajo de Jenkins y Hanson [6].

$$T(r) = \frac{C_2 \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1}\right)}{\ln \left(\frac{I_{\lambda_1}^{bb}(r)}{I_{\lambda_2}^{bb}(r)} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^5\right)}$$
(3.26)

La ecuación 3.26 puede ser reescrita en términos de la emisión de la llama a diferentes longitudes de onda. Como la fracción en volumen de hollín es una propiedad física, se considera independiente de la longitud de onda. Luego, de la ecuación 3.6 y recordando que $J_{\lambda} = \kappa_{\lambda} I_{\lambda}^{bb}$, la ecuación 3.26 se convierte en:

$$T(r) = \frac{C_2 \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1}\right)}{\ln \left(\frac{C_{\lambda_2}}{C_{\lambda_1}} \frac{J_{\lambda_1}(r)}{J_{\lambda_2}(r)} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^6\right)}$$
(3.27)

En el presente trabajo, la ecuación 3.27 es utilizada para calcular perfile radiales de la temperatura del hollín basado en las mediciones de emisión de la llama a dos longitudes de onda distintas. Para verificar que el algoritmo estuviera bien implementado y que la técnica funcionara bien, se calculó la temperatura de una llama de prueba de la cual existían datos en la literatura. La Figura 3.4 muestra los resultados para este caso, donde se reprodujeron las condiciones experimentales de la llama de Snelling *et al.* [53].



Figura 3.4: Temperatura en función del radio para una llama de etileno a 21% de oxígeno a una altura de 30 mm sobre el quemador.

Se presenta la temperatura experimental, que es la calculada en base a la técnica presentada mediante la reproducción del experimento en el laboratorio de la UTFSM, los datos de temperatura *coherent anti-Stokes Raman scattering* (CARS) y la temperatura calculada en [53]. Se puede observar que existe una gran concordancia entre los datos calculados y los existentes en la literatura.

3.3. Altura de la llama

Las mediciones de altura de llama son útiles para caracterizar una llama de difusión laminar debido a que pueden ser utilizadas para validar modelos numéricos y para estimar los tiempos de residencia de las partículas de hollín dentro de la llama. Para la determinación del contorno de la llama se llevan a cabo mediciones de quimioluminiscencia por medio de la liberación espontánea de radicales CH^{*}. Estos radicales han demostrado ser el centro de muchas vías químicas de combustión de hidrocarburos ya que ellos originan las reacciones entre O_2 y C_2H [54]. Es por esto que mediante la medición de la emisión de estos radicales se puede identificar la zona de reacción de la llama.

Para identificar el contorno de la llama se utiliza el método de segmentación desarrollado por Ko et al. [55]. Este método se basa en una distribución Gaussiana de probabilidad de que un pixel de la imagen pertenezca a la zona de reacción. La distribución Gaussiana de probabilidad puede ser estimada como:

$$p(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(\frac{(I(x,y) - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$
(3.28)

donde I(x, y) es el valor de la intensidad del pixel en la posición (x, y), μ es el promedio de todos los I(x, y) y σ es la desviación estándar de I(x, y). Dada esta distribución de probabilidad, un pixel pertenece a la zona de reacción si sobrepasa cierto valor límite, o sea si $p(x, y) > \tau$ donde τ es el umbral, entonces ese pixel corresponde a la zona de reacción. Este método ha probado ser confiable para detectar contornos de llamas [56] por lo que se utiliza en este estudio para obtener en particular la altura de la zona de reacción de la llama.

3.4. Análisis del error

Cada medición experimental tiene asociado un error que debe ser cuantificado. En el caso de este estudio se debe desarrollar un modelo para analizar el error para el cálculo de la fracción en volumen de hollín, la temperatura del hollín y la altura de la llama.

3.4.1. Fracción en volumen de hollín

De la ecuación 3.6 la fracción en volumen de hollín puede ser considerada una función de tres parámetros: el coeficiente de absorción κ_{λ} , la longitud de onda λ y la función de absorción C_{λ} . Dado esto, si se considera que todos los errores son independientes y aleatorios, el error total se puede cuantificar como sigue [57]:

$$\delta f_s = \sqrt{\left(\frac{\partial f_s}{\partial \kappa_\lambda}\delta \kappa_\lambda\right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial C_\lambda}\delta C_\lambda\right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial \lambda}\delta \lambda\right)^2} \tag{3.29}$$

donde δ representa la incertidumbre en cada una de las cantidades. Las derivadas parciales se pueden calcular fácilmente a partir de la ecuación 3.6:

$$\frac{\partial f_s}{\partial \kappa_\lambda} = \frac{\lambda}{C_\lambda} \tag{3.30}$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial C_\lambda} = -\frac{\kappa_\lambda \lambda}{C_\lambda^2} \tag{3.31}$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial \lambda} = \frac{\kappa_\lambda}{C_\lambda} \tag{3.32}$$

Si se estima la incertidumbre de cada una de las cantidades, mediante la ecuación 3.29 se puede cuantificar el error de la medición de la fracción en volumen de hollín. Según la ley de Bouguer, la incertidumbre relativa del coeficiente de absorción se puede calcular como sigue [58]:

$$\frac{\delta \kappa_{\lambda}}{\kappa_{\lambda}} = \frac{1}{\ln(I_0/I)} \left(\frac{\delta I_0}{I_0} + \frac{\delta I}{I} \right)$$
(3.33)

Por lo tanto con las mediciones del laboratorio se puede cuantificar fácilmente este error. La incertidumbre en la función de absorción se puede estimar como:

$$\delta C_{\lambda} = \sqrt{\left(\frac{\partial C_{\lambda}}{\partial n}\delta n\right)^2 + \left(\frac{\partial C_{\lambda}}{\partial k}\delta k\right)^2} \tag{3.34}$$

debido a que C_{λ} es una función que depende de los índices real e imaginario del índice de refracción del hollín. La incertidumbre en estos índices se encuentran en el trabajo de Chang y Charalampopoulos [43] y las derivadas parciales se pueden calcular fácilmente a partir de la ecuación 3.7 por lo que así se puede estimar la incertidumbre en esta cantidad. Por último, la incertidumbre en la longitud de onda puede ser estimada mediante el ancho de banda del filtro utilizado para la medición, con lo que se tienen todas las incertidumbres necesarias para cuantificar el error total en la fracción en volumen de hollín.

3.4.2. Temperatura

Usando el mismo análisis que el realizado para la fracción en volumen de hollín, la ecuación 3.27 muestra que la temperatura puede ser escrita como una función de λ_1 , λ_2 y un parámetro definido como el cuociente entre las emisiones de la llama $\Phi = \frac{J_{\lambda_1}}{J_{\lambda_2}}$. Luego, la incertidumbre en la temperatura medida está dada por:

$$\delta T = \sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial \lambda_1} \delta \lambda_1\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial \lambda_2} \delta \lambda_2\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial \Phi} \delta \Phi\right)^2} \tag{3.35}$$

donde las derivadas respecto a λ_i y Φ son calculadas basadas en el trabajo de Liu *et al.* [59]:

$$\frac{\partial T}{\partial \lambda_1} = -\frac{6\lambda_2}{C_2(\lambda_1 - \lambda_2)}T^2 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1(\lambda_1 - \lambda_2)}T$$
(3.36)

$$\frac{\partial T}{\partial \lambda_2} = \frac{6\lambda_1}{C_2(\lambda_1 - \lambda_2)} T^2 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2(\lambda_1 - \lambda_2)} T$$
(3.37)

$$\frac{\partial T}{\partial \Phi} = \frac{T^2}{\Phi C_2 \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right)} \tag{3.38}$$

Al igual que para la fracción en volumen de hollín, las incertidumbre en las longitudes de onda están dadas por el ancho de banda del filtro que se utiliza para medir las intensidades de emisión de la llama. La incertidumbre en el parámetro Φ está dada por la desviación estándar de todas las medidas tomadas de emisión para ambas longitudes de onda y por la precisión del instrumento, por lo que es una cantidad que se puede obtener fácilmente. Con todos estos valores se puede estimar el error en la temperatura medida del hollín.

3.4.3. Altura de la llama

Para el cálculo del error en la altura de la llama hay dos factores que considerar: la desviación estándar de los datos tomados por las cámaras y el valor que se impone en el umbral τ en el método de segmentación explicado anteriormente.

El error debido a la toma de imágenes se puede disminuir tomando varias imágenes en el laboratorio y utilizando su promedio, y como la llama a analizar es estable, es un error bastante pequeño. Para cuantificar el error debido a la selección del umbral a usar en el método de segmentación se realiza un análisis de sensibilidad donde se escoge un valor arbitrario del umbral y se varía hacia valores mayores y menores para analizar su efecto en la altura de la llama calculada.

Capítulo 4

Metodología experimental

En el presente capítulo se detalla la metodología y todas las condiciones experimentales utilizadas para llevar a cabo los experimentos en la llama inversa.

4.1. Instalación experimental

En primer lugar se diseñó una instalación experimental donde fuera posible realizar todos los diagnósticos ópticos y mediciones necesarias de manera simultánea. Para esto se utilizó el laboratorio de investigación de la UTFSM y dado el espacio disponible se dimensionó, diseñó e instauró un rack experimental para llevar a cabo las mediciones. El esquema de esta instalación se muestra en la Figura 4.1.



Figura 4.1: Esquema de la instalación experimental.

Esta instalación posee mesas ópticas THORLABS que tienen perforaciones en su superficie de tal forma de poder montar los diagnósticos ópticos y alinear todos los componentes de manera fácil. En estas mesas van montados todos los equipos como motores lineales, cámaras, filtros, etc. Cada uno de los equipos utilizados se detalla más adelante en el capítulo.

4.2. Quemador inverso y condiciones experimentales

El quemador inverso ocupado en este estudio consiste en un quemador de tubos concéntricos y es el mismo utilizado en los estudios de Mikofski, Blevins y Macko [22, 35, 36, 39]. Los diámetros de los tubos concéntricos de este quemador son 1, 3 y 6.4 cm para las secciones de oxidante, combustible y nitrógeno, respectivamente. Para este trabajo el combustible utilizado es etileno debido a que ha sido estudiado por diversos investigadores en NDFs y en algunos estudios sobre IDFs.

El índice de oxígeno se modificó desde 17% hasta un 37%. Cabe destacar que para índices de oxígeno menores a 17% la combustión no se pudo sustentar. Para variar el índice de oxígeno en el flujo de oxidante, se utilizó aire ambiente del laboratorio suministrado por un compresor y se dopó con oxígeno para lograr OI>21% y con nitrógeno para OI<21%. Para corroborar que las mezclas logradas fueran las mismas que usando oxígeno y nitrógeno puro, se generaron llamas de ambas formas (aire dopado y gases puros) sin observar cambios en la estructura de la llama. Los flujos de los distintos gases fueron controlados con cuatro flujómetros BROOKS INSTRUMENT de la serie SLA5850 conectados a un controlador central donde se fijan los flujos de manera digital. Las condiciones de los flujos de los distintos gases se resumen en la Tabla 4.1.

OI(%)	$Q_{\rm tot}({\rm slpm})$	$Q_{\rm aire}({ m slpm})$	$Q_{\rm N_2}({\rm slpm})$	$\operatorname{HRR}(W)$	$\Phi_{\rm global}$	$T_{ad}(K)$	$a(m/s^2)$	\mathbf{Fr}
17	2.20	1.78	0.42	115.5	21.51	2170	29.43	0.298
19	2.20	1.99	0.21	129.1	19.29	2296	31.14	0.289
21	2.20	2.20	0	142.7	17.51	2403	32.10	0.278
OI(%)	$Q_{\rm tot}({\rm slpm})$	$Q_{\rm aire}({ m slpm})$	$Q_{\rm O_2}({\rm slpm})$	$\operatorname{HRR}(W)$	$\Phi_{\rm global}$	$T_{ad}(K)$	$a(m/s^2)$	\mathbf{Fr}
23	2.20	2.14	0.06	156.3	16.03	2495	33.33	0.268
25	2.20	2.09	0.11	169.9	14.79	2575	34.40	0.257
27	2.20	2.03	0.17	183.5	13.73	2646	35.35	0.249
29	2.20	1.98	0.22	197.1	12.82	2709	36.20	0.244
31	2.20	1.92	0.28	210.6	12.02	2767	36.97	0.239
33	2.20	1.87	0.33	224.2	11.33	2820	37.67	0.234
35	2.20	1.81	0.39	237.8	10.71	2868	38.32	0.230
37	2.20	1.75	0.45	253.0	10.16	2919	38.99	0.232

Tabla 4.1: Condiciones experimentales.

Donde slpm significa standard litros por minuto. El HRR¹ se calcula basado en el calor de combustión del etileno asumiendo que el aire reacciona completamente. La relación de equivalencia global Φ_{global} se calcula como el cuociente entre combustible y oxidante dividido por el cuocioente entre combustible y aire a la estequiometría y se refiere a la cantidad global de aire y combustible a la salida del quemador. Se puede observar que este valor siempre es bastante mayor que 1 por lo tanto siempre se tienen mezclas globales con exceso de combustible, situación característica en IDFs. Para el cálculo de la temperatura de llama adiabática se utilizó el programa computacional desarrollado en STANJAN [60]. Para llamas controladas por la flotabilidad (buoyancy-controlled flames), la aceleración puede ser considerada como constante. Santoro et al. [61] mostraron que para distintas llamas normales la aceleración fue aproximadamente de 32.1 m/s^2 por lo que ese valor se utiliza para la condición de aire ambiente. Sin embargo, al aumentar el índice de oxígeno la aceleración dada por el empuje aumenta, por lo que para calcular el valor para cada condición de OI se utiliza la aceleración de condiciones ambiente como base y se multiplica por el cuociente entre la temperatura de llama adiabática de la condición con la temperatura de llama adiabática para OI=21 % [40]. Por último, el número de Froude (Fr) representa el cuociente entre el momentum inicial del flujo y las fuerzas de flotabilidad que experimenta la llama. Este número adimensional es calculado como [62]:

$$Fr = \frac{(V_{ox}Y_{ox})^2}{aH_f} \tag{4.1}$$

donde V_{ox} e Y_{ox} son la velocidad y la fracción másica a la estequiometría del oxidante, *a* es la aceleración media de flotabilidad y H_f es la altura de llama medida, mostrada más adelante en los resultados para cada condición. A través de este número se puede establecer si el régimen del flujo es controlado por el momentum (Fr>1), controlado por las fuerzas de flotabilidad (Fr<1) o una transición entre ambos (Fr \approx 1) [62]. Las llamas analizadas fueron controladas por fuerzas de flotabilidad con números de Froude menores que 0.3 para todas las condiciones.

El flujo de combustible se mantuvo constante para todos los OI en 2.7 slpm para reproducir las condiciones del experimento de Macko *et al.* [39] con aire ambiente y luego variar el índice de oxígeno. Como se muestra en el trabajo de Mikofski *et al.* [36], el flujo volumétrico de aire tiene influencia en la estructura de la llama para las IDFs por lo que, para detectar la influencia del índice de oxígeno sobre la estructura, se mantuvo el flujo de oxidante constante en 2.2 slpm durante todo el experimento variando los flujos de nitrógeno u oxígeno y el de aire ambiente para lograr los índices de oxígeno deseados. Por último, el flujo de inerte (nitrógeno) se mantuvo constante en 30 slpm. Para una llama de una altura 20 mm, el momentum desde el nitrógeno se transfiere aproximadamente un milímetro dentro de la corriente de combustible, por lo tanto, el efecto del inerte sobre la llama es considerado despreciable [39]. Todas las condiciones escogidas permiten caer en la zona III del mapa de llamas inversas explicado en el capítulo anterior por lo que se asegura obtener una llama que libere hollín y sea estable. Cabe destacar que como existen cantidades importantes de combustible sin quemar aguas abajo de la llama, a veces se generaban llamas secundarias si existía alguna

¹Tasa de liberación de calor, del inglés Heat Release Rate.

alteración en el ambiente, por lo que se procuró que el laboratorio estuviese lo menos perturbado posible mientras se realizaban las experiencias. Una llama inversa típica con estas condiciones para un OI de 21% se puede observar en la Figura 4.2.



Figura 4.2: Imagen de una llama inversa típica generada en el laboratorio.

Otros valores interesantes que se calculan a partir de las condiciones de flujo del experimento se resumen en la Tabla 4.2.

$\mathrm{Re}_{\mathrm{C_2H_4}}$	$\operatorname{Re}_{\mathrm{ox}}$	$\mathrm{V}_{\mathrm{C_2H_4}}$	Vox
(-)	(-)	$(\mathrm{cm/s})$	$(\mathrm{cm/s})$
175.6	308.2	7.16	46.7

Tabla 4.2: Valores calculados a partir de condiciones del flujo.

Los números de Reynolds son pequeños asegurando un flujo laminar para cada gas y son calculados como $Re = \frac{\rho V D_h}{\mu}$ donde las propiedades del gas son tomadas en el flujo frío a la salida del quemador y D_h es el diámetro hidráulico de la sección correspondiente.

4.3. Medidas cualitativas

4.3.1. Emisión de la llama a 800 nm y 660 nm

Para calcular la temperatura, que es una medida cuantitativa, se requiere tomar medidas de emisión de la llama a dos longitudes de onda. Estas medidas son cualitativas en el sentido que se obtienen en unidades arbitrarias que dependen de la apertura de la cámara y el tiempo de exposición para tomar las imágenes, y a través de su procesamiento se puede calcular la temperatura.

En la Figura 4.1 se observa la instalación experimental, donde el elemento 4 es una cámara CCD ANDOR LUCA destinada a tomar imágenes de emisión de la llama. La rueda de filtro (3 en la instalación) permite cambiar rápidamente los distintos filtros para observar la llama a diferentes longitudes de onda. En este caso se utilizan filtros de 800 nm (10 nm FWHM²) y de 660 nm (10 nm FWHM) de longitudes de onda suficientemente altas para captar solamente la emisión del hollín. La ecuación 3.27 se utiliza para calcular la temperatura en base a medidas cualitativas de emisión, sin requerir ningún tipo de calibración. Para que esta ecuación pueda ser utilizada correctamente se deben tomar imágenes con exactamente las mismas condiciones (apertura y tiempo de exposición) para ambas longitudes de onda, de lo contrario se estaría afectando algún parámetro de calibración y se obtendrían resultados erróneos.

Otra consideración que se debe tener al momento de calcular la temperatura a partir de la emisión de la llama es la transmisividad de cada uno de los elementos que existen entre la llama y la cámara, para obtener realmente la emisión de la llama. Un esquema que representa esto se puede observar en la Figura 4.3.



Figura 4.3: Esquema de la emisión de la llama hasta ser capturada por la cámara.

Como cada elemento tiene una cierta transmisividad, hay que reconstruir la señal para obtener la verdadera emisión de la llama. Si todas las transmisividades fueran independientes de la longitud de onda no existirían problemas porque se cancelarían en el cuociente de emisiones de la ecuación 3.27

 $^{^2 \}mathrm{Anchura}$ a media altura, del inglés Full Width at Half Maximum.

pero hay transmisividades que dependen de la longitud de onda por lo que deben ser consideradas. A partir del esquema mostrado se puede concluir que la intensidad capturada por la cámara es:

$$I_3 = \tau_1 \tau_2 \tau_3 I \tag{4.2}$$

por lo tanto, para obtener la intensidad de la llama se debe dividir la intensidad capturada por la cámara por la multiplicación de los factores de cada elemento, que pueden ser obtenidos de las curvas del fabricante. La ecuación 4.2 puede ser generalizada para N elementos que se interpongan entre la llama y la cámara.

Con todas las consideraciones anteriores se llevan a cabo las mediciones de emisión. Se toman 100 imágenes para cada longitud de onda para mejorar la relación señal/ruido. Para cada condición de OI se calibra el tiempo de exposición de la cámara para la longitud de onda de 800 nm, que es la que capta mayores intensidades, de tal forma que las imágenes no se saturen en ningún punto. Luego, con exactamente la misma configuración y procurando no mover la cámara, se cambia el filtro para tomar imágenes a 660 nm. Como los algoritmos de inversión se calculan desde el centro de la llama hacia afuera, para utilizar toda la información entregada por la cámara se promedian el lado derecho e izquierdo de la llama. Imágenes típicas obtenidas de la emisión de la llama a estas dos longitudes de onda bajo las mismas condiciones se muestran en la Figura 4.4, donde HAB es la altura sobre el quemador (Height above the burner). Con esta información se puede calcular la temperatura de la llama en base a la ecuación 3.27.



Figura 4.4: Imágenes de emisión de una llama inversa a 37 % de OI, en unidades arbitrarias.

4.3.2. Emisión espontánea de radicales CH*

Para calcular la altura de la llama se toman 100 imágenes de emisión de radicales CH* mediante el uso de un filtro de 431 nm (10 nm FWHM). La cámara utilizada es la misma destinada a la emisión de 660 y 800 nm y el filtro está montado en la rueda de filtros. Las imágenes tomadas por esta cámara poseen una resolución espacial de 1004 x 1002 pixeles y dada la posición de la cámara respecto al quemador se tiene un área de cada elemento de imagen de 0.14 mm x 0.14 mm. Mediante el método de segmentación explicado en la sección anterior entonces se puede determinar el contorno de la llama y en particular calcular la altura de la llama. Un ejemplo de la aplicación de este método se presenta en la Figura 4.5.



Figura 4.5: Ejemplo del método de segmentación de Ko aplicado a una llama normal de etileno a 21 % de OI.

4.4. Medidas cuantitativas

4.4.1. Atenuación del láser en el camino óptico

Para obtener la fracción en volumen de hollín se toman mediciones de atenuación a través de la línea de visión (line-of-sight attenuation, LOSA) de un láser a una determinada longitud de onda utilizando la técnica MAE. Para esto se utiliza un láser THORLABS de 660 nm, indicado con el número 2 en la Figura 4.1. El haz de luz debe pasar a través de la llama para luego ser concentrado por un lente acromático y llegar hasta la cámara CCD. Antes de la cámara se tiene un filtro neutro para disminuir la intensidad del láser para que no se sature la imagen, un agujero de aguja o pinhole para eliminar el ruido indeseado y un filtro de 660 nm (10 nm FWHM) para asegurar la toma de información a esa determinada longitud de onda. El láser es pulsado con una frecuencia de 1 Hz mediante un generador de pulsos a una intensidad de 1500 mA. La cámara colecta imágenes con

el láser encendido y apagado, con la llama encendida y con la llama apagada para obtener las 4 cantidades necesarias para el cálculo de la fracción de luz transmitida τ según la ecuación 3.4. Un esquema de estas cantidades en un gráfico de intensidades en función del tiempo se muestra en la Figura 4.6. Para cada medición se toman al menos 100 imágenes para mejorar la relación señal/ruido con una resolución de 1038 x 1384 pixeles, lo que resulta en un área de 0.06 mm x 0.06 mm para cada elemento de imagen.



Figura 4.6: Esquema de las intensidades del láser para las distintas condiciones.

En la Figura 4.7 se muestra cada una de las imágenes obtenidas a través de la modulación del láser para una llama inversa de etileno con un OI de 37%. Generalmente las imágenes con el láser apagado tienen poca información en el sentido que son matrices casi nulas en todos los puntos, pero en el caso de existir alguna fuente de iluminación extra, sirven para rescatar solo la información de la llama. A partir de estas cuatro imágenes se puede calcular la fracción de luz transmitida y con ello el grosor óptico.



Figura 4.7: Intensidades recogidas por la cámara.

La Figura 4.8 muestra una imagen en dos dimensiones para el espesor óptico de una IDF a 37% de oxígeno. Mediante este tipo de imágenes y los algoritmos de inversión se puede calcular la fracción en volumen de hollín local de la llama para cada punto.



Figura 4.8: Mapa 2D del espesor óptico de una llama inversa con un OI de 37 %.

4.4.2. Radiación

Para medir la radiación emitida por la llama se utiliza un radiómetro Medtherm modelo 64-0.5-15 del tipo Schmidt-Boelter representado por el número 13 en el esquema experimental, el cual posee una ventana de zafiro con un ángulo de 150° para eliminar cualquier lectura de calor por convección. El radiómetro fue montado en un motor lineal THORLABS (12 en el esquema experimental) ubicado paralelamente al eje de la llama a una distancia de 150 mm obteniendo medidas de radiación desde 30 mm bajo hasta 120 mm sobre el quemador con una velocidad constante de 3 mm/s.

Capítulo 5

Presentación y análisis de resultados

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos de las distintas cantidades a analizar en este estudio, calculadas según la metodología descrita en secciones anteriores. Como la llama de difusión inversa no había sido encendida nunca antes en el laboratorio, y dada la cantidad de combustible sin quemar que se libera, como trabajo previo se analizaron llamas normales de etileno, propano y butano para validar todos los algoritmos y procedimientos.

A continuación se presentan algunos resultados obtenidos para una llama normal de etileno que se encuentran dentro del contexto del trabajo en desarrollo *Effects of oxygen index on soot production in laminar coflow diffusion flames of C2 to C4 fuels* [63] para validar los métodos utilizados y para luego poder comparar una llama normal y una llama inversa de etileno. Luego se presentan todos los resultados pertinentes para la llama de difusión inversa que interesa para este estudio.

5.1. Llama de difusión normal

Las distintas curvas obtenidas de llamas de difusión normal de etileno son analizadas en profundidad en los trabajos [63, 64]. En este estudio sólo se muestran algunas curvas interesantes para poder comparar con los resultados obtenidos para llamas inversas de etileno.

Para generar las llamas de etileno analizadas [63] se utilizó un quemador del tipo Gülder [65] con diámetro de inyección de combustible de 11 mm y de oxidante de 100 mm. El flujo de combustible utilizado se mantuvo constante en 2.022 cc/s para todas las condiciones y el oxidante se varió para lograr los distintos OI.

5.1.1. Altura de llama

En la Figura 5.1 se muestra la variación de la altura de la zona de reacción de una NDF en función del OI. La altura de la zona de reacción se define como el punto más alto de la zona de reacción medida por el eje de simetría de la llama. Se puede observar que la altura de la llama se reduce al aumentar el OI, lo que es consistente con la variación de la estequiometría. Al aumentar el OI

se incrementan las tasas de producción de hollín pero también existen más agentes oxidativos que aumentan las tasas de oxidación, por lo que la cantidad de hollín se ve aumentada (como se muestra en la siguiente sub-sección) y la altura de llama disminuida.



Figura 5.1: Altura de la llama normal de etileno en función del OI.

La variación total de altura es desde 38.4 mm hasta 19.6 mm lo que se traduce en una disminución de casi un 50% al aumentar el OI desde 19% hasta 37%.

5.1.2. Temperatura y fracción en volumen de hollín

En la Figura 5.2 se muestran perfiles radiales de temperatura y fracción en volumen del hollín. Como las alturas de las llamas varían apreciablemente en función del OI, se escogen alturas normalizadas por la correspondiente altura de llama para poder comparar las tendencias.

Comparando cada altura normalizada se puede observar que existen comportamientos similares para cada llama. Al aumentar el índice de oxígeno existe un incremento en la cantidad de hollín para las mismas alturas relativas, siendo el máximo aproximadamente 7 ppm para un índice de oxígeno de 37 %, y también un aumento en la temperatura del hollín para alcanzar un máximo de 2150 K para el mismo OI. Los perfiles radiales de temperatura y hollín aumentan al avanzar en la posición radial hasta alcanzar el máximo y luego empezar a disminuir. Este máximo se alcanza aproximadamente en la posición de la zona de reacción. Al aumentar la distancia en dirección del eje de la llama, los máximos de temperatura y fracción en volumen de hollín ocurren a menores posiciones radiales debido a que la llama se vuelve más delgada a medida que se acerca a la punta de la llama. En el caso de NDFs bajo el punto de humo las llamas son cerradas, lo que significa que al alcanzar la altura de llama, ésta se cierra en aproximadamente un punto.



Figura 5.2: Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín y temperatura OIs de (a) 25 %, (b) 31 % y (c) 37 % en una llama normal de etileno.

Fracción en volumen de hollín integrada

Una buena forma de evaluar la producción global de hollín en cada altura sobre el quemador es calculando la fracción en volumen de hollín integrada β definida como:

$$\beta(z) = \int_0^{2\pi} \int_0^R f_s(r) dr r d\theta$$
(5.1)

Esta cantidad sirve como un indicador de la evolución de la producción de hollín a través de la altura de la llama. Este parámetro se grafica en la Figura 5.3a en función de la altura sobre el quemador normalizada por la altura calculada por la teoría de Roper [37, 38] para los distintos índices de oxígeno. Además se muestra en la Figura 5.3b la evolución del máximo β como función del índice de oxígeno.



Figura 5.3: (a) Fracción en volumen de hollín integrada para las distintas alturas normalizadas sobre el quemador y (b) fracción en volumen de hollín integrada máxima como función del OI.

En esta figura se ratifica la tendencia al alza de la producción total de hollín a medida que se aumenta el índice de oxígeno observada antes en los perfiles radiales de la fracción en volumen de hollín. Para este caso el máximo de β se incrementa en un 66 %. Aunque se aumenta la cantidad de hollín global en la llama, ésta sigue estando bajo el punto de humo debido a que los mecanismos de oxidación también se ven favorecidos al existir mayor cantidad de oxígeno.

5.1.3. Radiación

La Figura 5.4 muestra la evolución de la pérdida total radiativa de la llama en función del OI. En el eje de las ordenadas a la derecha se muestra la energía por unidad de tiempo que libera la llama y en el de la izquierda la fracción radiativa definida simplemente como el cuociente entre la pérdida total radiativa (PTR) y el HRR:

$$\chi_r = \frac{PTR}{HRR} \tag{5.2}$$

con $HRR = \dot{m}LHV$, donde \dot{m} es el flujo másico de combustible y el LHV es el poder calorífico inferior del combustible, producto que para este combustible en las condiciones del experimento corresponde a HRR=120.08 W y se calcula asumiendo que el combustible reacciona por completo a diferencia de la llama inversa que se calcula asumiendo que el aire reacciona completamente. Como se muestra en el capítulo 4, el flujo total de energía liberada por la llama inversa se estima en 142.7 W para condiciones ambiente, por lo que en términos energéticos la llama normal e inversa analizadas son relativamente comparables.



Figura 5.4: Radiación emitida por la llama en función del OI.

Se puede apreciar un incremento en el calor liberado por radiación por parte de la llama a medida que aumenta el OI. La cantidad de hollín también se ve favorecida con el OI por lo que los resultados muestran que ambas cantidades están directamente relacionadas. Para este caso se presenta un incremento de aproximadamente un 20% al pasar de condición ambiente hasta un 37% de OI.

5.2. Llama de difusión inversa

Todos los resultados presentados en la sección anterior se muestran para tener un orden de magnitud de las distintas cantidades en una llama normal. A continuación se muestran los resultados para llamas inversas de etileno y se comparan con los presentados anteriormente.

5.2.1. Altura de llama

A continuación se presentan los resultados de la altura de llama calculada para las distintas condiciones de OI en el oxidante. En primer lugar cabe destacar que existen dos alturas reconocibles de la llama: la altura de la zona luminosa y la altura de la zona de reacción, que en llamas de difusión inversa se pueden diferenciar claramente. En la Figura 5.5 se puede observar esquemáticamente la altura de ambas zonas. Para diferenciar la altura de la zona luminosa de la zona de reacción simplemente se cambia el valor umbral τ en el algoritmo de Ko, escogiéndose valores muy altos para identificar la zona de reacción y valores bajos para la zona luminosa de la llama.



Figura 5.5: Altura luminosa y de la zona de reacción para una llama inversa a 37 % de OI.

Las altura de las llamas para las distintas concentraciones de oxígeno se muestran en la Figura 5.6. Cabe destacar que para la llama de OI=17 % no se pudo detectar una diferencia entre la zona de reacción y la zona luminosa debido a la poca cantidad de hollín generada, por lo que ambas alturas se consideraron iguales. La altura de la llama con una condición de OI=21 % es de aproximadamente 21.5 mm, lo que concuerda con el experimento realizado por Mikofski *et al.* [36] bajo las mismas condiciones. Se puede observar que la altura de la zona de reacción disminuye a medida que se aumenta el índice de oxígeno de manera aproximadamente lineal, a diferencia de la zona luminosa que tiende a aumentar pero sin presentar un comportamiento lineal. La tendencia de la disminución de la altura de la zona de reacción al aumentar el OI fue encontrada también en el estudio de [40].

Los errores que se presentan en la Figura 5.6 fueron calculados en base a un análisis de sensibilidad de valor umbral τ para la identificación de las distintas zonas. Una vez escogido un valor alto o bajo para identificar la zona de reacción o luminosa, respectivamente, se varía este valor en un 40 % hacia arriba y hacia abajo para reconocer los cambios en la altura de la llama. En todos los casos la variación de la altura de las llamas dado este análisis fue siempre menor que un 5.5 %, siendo

más sensible la altura de la zona luminosa que la de la zona de reacción y para índices de oxígeno menores debido a que la señal recibida por la cámara era más débil.



Figura 5.6: Altura luminosa y de la zona de reacción para las distintas llamas analizadas.

La disminución de la altura de la zona de reacción es desde 22.3 mm a 17% hasta 19.3 mm para 37% de OI, lo que se traduce en una disminución en la altura de un 13.2% que es bastante menor que en la llama normal analizada que fue de un 50% al aumentar el OI desde 19% hasta 37%. Las alturas de las IDFs analizadas son comparables a las NDFs descritas en la sección anterior, sobre todo para OIs mayores. Es por esto que a pesar de utilizar flujos diferentes y quemadores de geometrías distintas, las llamas de ambos experimentos pueden ser comparadas entre sí para analizar las diferencias entre IDFs y NDFs.

5.2.2. Fracción en volumen de hollín

A continuación se presentan varios perfiles radiales de la fracción en volumen de hollín. Se comparan perfiles a distintas alturas sobre el quemador, pero dado que la altura de la zona de reacción de la llama no varía de manera importante, se escogen las mismas alturas para cada una de las condiciones de concentración de oxígeno.

En la Figura 5.7 se observa como varía el espesor óptico para las distintas concentraciones de oxígeno. A medida que el índice de oxígeno aumenta el espesor óptico es mayor, por lo que se obtienen concentraciones de hollín mayores. Además, en cada una de las llamas se observa que el grosor óptico es mayor en las zonas donde el hollín se forma y se mueve a zonas más altas de la llama por efectos de flotabilidad.



Figura 5.7: Grosor óptico para llamas inversas a distintos OI.

A partir de la información bidimensional de la Figura 5.7 se calculan los perfiles radiales de hollín, que se muestran en la Figura 5.8. Para la condición de OI de 21 % a una altura de 15 mm sobre el quemador se obtienen resultados similares a los obtenidos por Macko *et al.* [39], que obtuvo perfiles radiales con valores menores a 0.4 ppm para esa condición, por lo que se valida el procedimiento de cálculo y la reproducción de las condiciones experimentales en el laboratorio utilizado. Los errores encontrados dado el análisis de error desarrollado anteriormente son menores a $\frac{\delta f_s}{f_s} = 30\%$ en todos los casos. Estos errores no se grafican en la Figura 5.8 para no sobrecargarla.











49







Figura 5.8: Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín para las distintas condiciones experimentales.

Se puede observar que al igual que en las llamas normales anteriores, la tendencia general es el aumento de la concentración de hollín a medida que el índice de oxígeno se incrementa, pasando de máximos de aproximadamente 0.5 ppm para OIs bajos hasta casi 3.5 ppm para el OI de 37 %. Estos valores son más bajos que en llamas normales, donde el máximo para 37 % de oxígeno alcanza las 7 ppm. Cuando se agrega oxígeno al oxidante se afectan dos mecanismos en términos de la producción de hollín. Por una parte se aumenta la temperatura de la llama lo que conlleva a un incremento en las tasas de formación del hollín y en la pirólisis del combustible, por lo tanto las tasas de nucleación y crecimiento de superficie del hollín son mayores por lo que es más probable que la llama produzca mayores concentraciones de hollín [66, 67]. Por otro lado, mayores OI promueven mecanismos de oxidación y reducen los tiempos de residencia de las partículas de hollín, lo que hace que disminuya su concentración [68]. Estos dos efectos se pueden observar claramente en llamas normales analizando los perfiles a distintas alturas sobre el quemador, sin embargo, en llamas inversas la oxidación no es importante debido a que el hollín que se forma se mueve hacia afuera de la llama y no alcanza a ser oxidado. Por esto, a medida que aumenta el índice de oxígeno aumenta la fracción en volumen de hollín. Al igual que en llamas normales, las concentraciones de hollín tienden a aumentar con el radio hasta llegar a un máximo y comenzar a decrecer. La posición de estos máximos se va acercando hacia el eje de la llama pero en ninguna de las llamas analizadas se llega al centro, debido a que el hollín en IDFs tiende a moverse a regiones más frías (hacia a fuera de la llama) y no hacia el centro como en NDFs debido a la posición de la invección de combustible. Además, esto es consistente con el hecho de que la llama no sea cerrada en la punta como se puede observar en las Figuras 4.2 o 5.6, a diferencia de las llamas normales.

Si bien la zona de reacción es de una altura de aproximadamente de 20-22 mm para todas las llamas, se puede observar que la cantidad de hollín sigue aumentando por sobre esa altura por lo que se puede concluir que éste se sigue formando y creciendo más allá de la zona de reacción, siempre que la temperatura sea lo suficientemente alta (>1600 K) [40] lo que se corrobora en la siguiente sección.

Fracción en volumen de hollín integrada

Para calcular la fracción en volumen de hollín integrada a cada una de las alturas sobre el quemador se utiliza la ecuación 5.1. Esta ecuación se puede aproximar a una sumatoria como:

$$\beta(z) = 2\pi\Delta r \sum_{i=1}^{N} f_s(r_i) r_i$$
(5.3)

donde N = 150 es el número de pixeles radiales en la imagen, r_i es la posición radial (en metros) correspondiente al pixel *i* y Δr es el paso radial que al ser constante sale de la sumatoria.

Este parámetro β se grafica en la Figura 5.9a en función de la altura sobre el quemador para los distintos índices de oxígeno. No se graficaron las curvas integradas para índices de oxígeno menores

a $21\,\%$ debido a que al ser tan poca la cantidad de hollín no se pudo apreciar una tendencia clara como en el resto de las curvas.



Figura 5.9: Curvas de (a) fracción en volumen de hollín integrada y (b) máximo β en función del OI con la altura sobre el quemador donde ocurre ese máximo.

En la Figura 5.9a se observa claramente la tendencia de la llama a generar una mayor cantidad de hollín total a medida que se aumenta el OI por las razones discutidas anteriormente. La cantidad de hollín integrada varía entre aproximadamente 0.9 y 3 (x 10^{-10} m²) en el caso de la llama inversa lo que es menor que en NDFs para bajos OIs, lo que es consistente con el estudio experimental de Macko *et al.* [39] y numérico de Kaplan y Kailasanath [34].

En la Figura 5.9b se grafican las concentraciones integradas máximas para cada OI con sus respectivos errores y la altura sobre el quemador HAB_{max} donde ocurre cada máximo. Se puede observar que prácticamente todos los máximos ocurren a la misma altura de 38.2 mm sobre el quemador. Esto sucede también en llamas normales, pero a la misma altura normalizada [63,64], pero dado que en las llamas inversas analizadas la altura de la llama no varía de manera importante (9-10%) tampoco varían los parámetros geométricos para las distintas condiciones. El máximo de β se incrementa un 255% aproximadamente en el rango de OIs analizado, lo que es bastante mayor que las llamas normales analizadas (66%). Por último, la tendencia de incremento de β_{max} en función del OI es bastante lineal en el rango estudiado.

Angrill *et al.* [69] cuantificaron las tasas de oxidación y formación de distintas llamas normales mediante la pendiente de las curvas de $f_s(r = 0)$ (fracción en volumen de hollín en el eje de la llama) en función de la altura sobre el quemador. En el caso de las llamas inversas analizadas, en el eje de la llama existe muy poco hollín como para que esas curvas entreguen información útil. Es por esto que se utiliza el mismo procedimiento que en [69] pero utilizando las curvas de la Figura 5.9a, que justamente representan la evolución de la producción total de hollín en función de la altura. Antes de alcanzar un máximo en las curvas la pendiente es positiva, lo que indica que los procesos de formación se imponen frente a los de oxidación del hollín. Al contrario, después del máximo, los procesos de oxidación comienzan a preponderar. En base a lo anterior se construye la Figura 5.10.



Figura 5.10: Pendientes de β para cuantificar tasas de oxidación y formación, en función del índice de oxígeno.

La Figura 5.10 muestra las pendientes a la izquierda (predomina formación, signo positivo) y la derecha (predomina oxidación, signo negativo) de la curva graficada en la Figura 5.9a, con el máximo error para cada una, donde en este caso z denota la altura sobre el quemador. Se puede observar que la pendiente en la zona donde las tasas de formación es mayor a las de oxidación sigue un incremento bastante lineal en función del OI, lo que corrobora que al aumentar el índice de oxígeno se ven favorecidos los mecanismos de formación en llamas inversas, por lo que hace que la cantidad de hollín tienda a aumentar, como se ha observado en los resultados anteriores. Por otro lado, las pendientes de la zona después del máximo no poseen un comportamiento claro, incluso tendiendo a mantenerse más bien constantes. En base a esto se puede decir que las tasas de oxidación no aumentan de manera apreciable con el OI como sí sucede en NDFs en el rango estudiado, lo que concuerda con que el hollín en las llamas inversas no pasa fuertemente por procesos de oxidación. Una observación no cuantificable en este estudio de lo mencionado anteriormente es que a medida que se aumentaba el OI, cada vez se libera mayor cantidad de hollín sin oxidar hacia el medio ambiente.

5.2.3. Temperatura del hollín

En la Figura 5.11 se muestran perfiles radiales de temperatura para las distintas condiciones experimentales. Dado el procedimiento que se utiliza para calcular la temperatura, si la diferencia entre las señales recibidas por la cámara a dos longitudes de onda distintas es muy similar o cada señal es muy pequeña, la temperatura que se obtiene es muy alta. Es por esto que no se grafican las curvas

1400

ō

4 r (mm)

(c)

3

7

8

6

5

para 17% y 19% de hollín ya que la luminosidad de la llama era demasiado baja. Por esto mismo se escogen niveles acotados de altura, entre 15 y 25 mm sobre el quemador, donde la luminosidad de la llama es mayor. Por esto, al analizar la forma de las curvas se debe tener en cuenta que se posee una mayor confiabilidad en zonas donde la señal es mayor, cercano a la zona de reacción de la llama o donde se encuentran los máximos de la fracción en volumen de hollín.



1400

Ő

2 3 4 5

r (mm)

(d)

8

6





Figura 5.11: Perfiles radiales de temperatura del hollín para las distintas condiciones experimentales.

En estos perfiles se puede observar que la temperatura aumenta a medida que se avanza radialmente hacia la zona de reacción. La temperatura en la posición radial entre 4-7 mm, que es la zona donde se encuentra la mayoría de los máximos de la fracción en volumen de hollín (Fig. 5.8) y las mayores intensidades (Fig. 4.4) se mantiene entre aproximadamente 2000-2500 K para las distintas condiciones. Esto corrobora que la temperatura de la llama es suficientemente alta (pero nunca superior a la temperatura de llama adiabática) para que los procesos de formación de hollín sigan ocurriendo a medida que se avanza en la altura de la llama. En los casos analizados, los máximos de temperatura están ubicados un poco más hacia el centro que los máximos de fracción en volumen de hollín, como se espera por la estructura de una llama de difusión inversa.

Los errores calculados asociados a la temperatura no se graficaron en la figura anterior para no sobrecargarla. Estos errores se cuantifican en la Figura 5.12, donde se muestra el error absoluto y relativo en la temperatura en función de la temperatura medida, utilizando $\delta\lambda_1 = \delta\lambda_2 = 5$ nm que es la mitad del ancho de banda del filtro utilizado para cada longitud de onda. Se puede observar que para mayores temperaturas el error es cada vez mayor, y justamente cuando el cuociente $\Phi = \frac{J_{\lambda_1}}{J_{\lambda_2}}$ es pequeño se obtienen las mayores temperaturas, o cuando cualquiera de las señales es cercana a valores nulos.



Figura 5.12: Curvas de error (a) absoluto y (b) relativo para el cálculo de la temperatura del hollín.

5.2.4. Tiempo de residencia

En la Figura 5.13 se grafican los tiempo de residencia calculado en base a las alturas luminosa y de la zona de reacción de la llama considerando la aceleraciones de flotabilidad de la Tabla 4.1 y se

calculan como sigue [40]:

$$t_{res} = \frac{1}{a} \left(\sqrt{2aH_f + V_f^2} - V_f \right)$$
(5.4)

Todos los tiempos de residencia se encuentran entre 30-40 ms para todas las condiciones estudiadas. Se grafican los máximos errores para cada condición, calculados en base a los errores en el calculo de las alturas de la llama.

Se puede observar que considerando la altura de la zona de reacción, los tiempos de residencia de las partículas bajo esta zona disminuye con el aumento del OI. Esto se da por la combinación de dos efectos: el aumento de la aceleración con el OI y la disminución de la altura de la zona de reacción, donde ambos contribuyen a disminuir el tiempo de residencia de una partícula. Sin embargo, como se ha mencionado anteriormente, más allá de la zona de reacción las partículas siguen experimentando altas temperaturas por lo que pueden seguir creciendo, por lo tanto es más correcto utilizar la altura luminosa de la llama para calcular el tiempo de residencia. En este caso, como la altura de la zona luminosa tiende a aumentar a medida que crece el OI para el rango estudiado, su efecto se contrapone al del aumento de la aceleración en términos del tiempo de residencia. Es por esto que en este caso el tiempo de residencia tiende a mantenerse aproximadamente constante cerca de los 37-38 ms. Al ser los tiempos de residencia similares para las distintas condiciones de OI pero ser afectados por mayores tasas de formación, la cantidad de hollín se ve aumentada con el índice de oxígeno.



Figura 5.13: Tiempo de residencia de una partícula calculado en base a la altura de la zona de reacción y la zona luminosa.

5.2.5. Radiación

En la Figura 5.14 se observan las mediciones realizadas para la radiación. A la izquierda se muestra la distribución vertical del flujo de calor por radiación desde 20 mm bajo el quemador hasta 130 mm sobre el quemador para cada una de las condiciones estudiadas. El valor absoluto de cada una de estas curvas no es un buen parámetro de comparación con otros trabajos u otras condiciones debido a que es la energía recibida por el radiómetro y depende de la distancia a la que éste se encuentra de la llama. De todas formas es un buen gráfico para comparar cualitativamente las distintas condiciones. Se puede observar claramente una tendencia al aumento del calor por radiación recibido por el radiómetro a medida que se aumenta el OI. Las curvas mostradas en la Figura 5.14a son similares a las presentadas en la Figura 5.9a para la fracción en volumen de hollín integrada.



Figura 5.14: (a) Distribución vertical del flujo radiativo en función de la altura sobre el quemador y (b) fracción radiativa de la llama como función del OI.

En la Figura 5.14b sí se tiene un valor que depende de la llama. En base a las curvas de la distribución vertical del flujo radiativo se puede calcular la fracción radiativa como:

$$\chi_r = \frac{2\pi R \int_{z_1}^{z_2} q''(z) dz + \pi R^2 q''(z_1) + \pi R^2 q''(z_2)}{HRR}$$
(5.5)

donde R es la distancia del radiómetro al eje de la llama, z_1 y z_2 son la altura de inicio y fin de medición respectivamente. Para esto se asume que toda la radiación emitida por la llama es recibida por la superficie de un cilindro de radio R y altura $z_2 - z_1$ con el centro en el eje de la llama. Esta ecuación se puede resolver numéricamente de la misma forma que la ecuación 5.1. Cabe destacar que también se pueden obtener valores de la potencia liberada por la llama mediante menos mediciones con el radiómetro utilizando el factor de forma entre la llama y el radiómetro, pero es bastante complejo debido al cálculo del factor de forma y por la definición de la superficie por la que la llama irradia toda su energía. Ambos métodos se probaron para distintas NDFs y no se encontraron diferencias significativas por lo que se decidió utilizar la ecuación 5.5 debido a su simplicidad.

La pérdida total por radiación liberada por la llama aumenta casi linealmente respecto al OI, desde aproximadamente 3 hasta 22 W lo que significa un aumento de un poco más de 7 veces en la potencia radiativa al variar el OI desde 17% hasta 37%. Este calor por radiación liberado por la llama es bastante menor que en las llamas normales analizadas para condiciones de OI bajos, donde se liberan aproximadamente 16 W de calor. Esto muestra que la transferencia de calor por radiación está directamente relacionada con la cantidad de hollín en la llama, debido a que para las llamas normales, en las cuales la cantidad de hollín es mayor, consecuentemente la radiación es mayor. En este caso, a diferencia de las llamas normales, la pérdida total radiativa de la llama depende del OI, como se muestra en la Tabla 4.1 por lo que la fracción radiativa varía entre aproximadamente 2.6 a 9%, a diferencia de la llama normal que libera entre el 14.5 y 19%. Los errores mostrados en la Figura 5.14b se calculan en base a un análisis estadístico de la medición del radiómetro para cada una de las condiciones a cada altura de la llama, siendo en todos los casos analizados menor a 2.5% en relación al HRR.

Capítulo 6

Conclusiones

Mediante el estudio realizado se pudo lograr el objetivo principal de evaluar los efectos del índice de oxígeno en la radiación, geometría, temperatura y producción de hollín en una llama de difusión laminar inversa. Para esto el estudio se dividió en dos etapas principales: el diseño e implementación de la instalación experimental y luego el desarrollo teórico para el cálculo de cada cantidad y la realización de campañas experimentales en distintas condiciones para obtener y analizar los datos pertinentes a la investigación. La instalación experimental fue validada reproduciendo experiencias de la literatura y actualmente se encuentra en funcionamiento en la UTFSM.

Respecto a la teoría, se logró desarrollar modelos teóricos e implementarlos en MatLab para calcular perfiles radiales de la fracción en volumen y temperatura del hollín, mediante métodos de deconvolución y regularización a partir de información integrada de la llama en el camino óptico. Estos métodos fueron probados comparando con información presente en la literatura y de esta forma se verificó su buen funcionamiento. También se implementaron otras rutinas computacionales para calcular la altura y radiación de la llama en cuestión. Por último se hizo un análisis para cuantificar el error para cada cantidad medida.

Las técnicas no intrusivas utilizadas para medir temperatura y fracción del hollín son de rápida respuesta y de relativamente fácil implementación. Además aseguran mediciones sin perturbar la llama, por lo que se podrían modificar y mejorar para ser utilizadas en escalas industriales ya sea en calderas, quemadores, motores de combustión interna u otros.

Respecto a los resultados obtenidos se puede concluir lo siguiente:

• Al aumentar el índice de oxígeno la altura de la zona de reacción de la llama, medida por emisión espontánea de radicales CH*, se ve disminuida desde 22.3 mm hasta 19.3 mm al pasar desde 17 % a 37 % de OI. Esta disminución es bastante menos pronunciada que en llamas normales como la que se analizó con propósitos de comparación, donde la altura disminuyó desde 38.4 mm hasta 19.6 mm cuando el OI se varía entre 19 % a 37 %. La zona luminosa de la llama aumenta a medida que el OI se incrementa y se separa de la altura de la zona de reacción siendo en todos los casos analizados más alta. Lo anterior se puede atribuir a que el hollín se sigue formando y creciendo más allá de la altura de la zona de reacción dadas las condiciones

de temperatura.

- La temperatura del hollín se mantiene aproximadamente entre 2000-2500 K cerca de las posiciones radiales donde se encuentran los máximos de fracción en volumen de hollín para las condiciones estudiadas. Esta temperatura se mantiene por sobre la altura de la zona de reacción de la llama lo que favorece la formación de nuevas partículas de hollín y su crecimiento.
- Los tiempos de residencia de las partículas en la llama decrecen al considerar la altura de la zona de reacción pero se mantienen aproximadamente constantes al considerar la altura de la zona luminosa de la llama debido a que el aumento de aceleración con el OI tiende a disminuir el tiempo de residencia y el incremento de la altura lo tiende a aumentar, efectos que para los casos estudiados se encuentran en equilibrio. Como procesos de formación del hollín siguen ocurriendo más allá de la altura de la zona de reacción, parece ser más adecuado utilizar los tiempos de residencia calculados con la altura de la zona luminosa de la llama para el análisis. Al tener tiempos de residencia muy parecidos para todas las condiciones, no hay que preocuparse de este parámetro para el análisis del resto de las cantidades.
- La fracción en volumen de hollín se ve favorecida al aumentar el índice de oxígeno, lo que se puede observar en los máximos de los perfiles radiales de hollín y en la fracción en volumen de hollín integrada. Esto se puede explicar debido a que se aumentan las tasas de formación del hollín y las tasas de oxidación no parecen aumentar de manera significativa. Las formas de los perfiles radiales de hollín es similar a las de NDFs pero sus máximos no tienden a moverse al centro de la llama a medida que se avanza en altura porque el hollín que se forma se mueve hacia regiones más frías afuera de la llama. En el rango de OIs estudiado, los máximos de la fracción en volumen de hollín integrada tienen una tendencia lineal al aumento, y aunque los mecanismos de formación se favorecen con el OI y la aceleración y tiempos de residencia también se ven afectados, las alturas donde ocurren estos máximos son prácticamente la misma para todas las condiciones.
- La radiación de la llama se ve favorecida a medida que el OI aumenta, como se pudo observar cualitativa y cuantitativamente. El calor total liberado por la llama aumenta de manera apro-ximadamente lineal con el OI de manera similar a la fracción en volumen integrada. A mayor cantidad de hollín producido dentro de la llama, mayor es la radiación emitida por esta, lo que hace vincular al hollín con la transferencia de calor por radiación. La fracción radiativa para las llamas inversas es bastante pequeña, lo que significa que gran parte de la energía disponible se libera como calor sensible, calentando el quemador o los gases que rodean la llama.

Comparando las IDFs analizadas con la NDFs que se presentaron en un principio se puede observar lo siguiente:
- La fracción en volumen de hollín integrada es menor en la llama inversa respecto a la normal, sobre todo en condiciones de OI cercanas a las ambientales, debido a que el hollín que se forma en IDFs escapa de la llama sin oxidarse por completo. Comparando los perfiles radiales de hollín también se pudo observar la diferencia entre las cantidades para los dos tipos de llamas.
- La temperatura cerca de la posición radial de máxima fracción en volumen de hollín es similar para IDFs y NDFs superando los 2000 K, pero en IDFs esta temperatura se mantiene por sobre la altura de la zona de reacción.
- La radiación de la llama normal se mueve entre 16 y 23 W al variar el OI desde condiciones ambiente hasta 37 %, y la llama inversa esta variación es desde 3 hasta 22 W para las mismas condiciones. Esto se relaciona directamente con la cantidad de hollín producida por cada llama, donde la NDF al producir más hollín tiene una mayor transferencia de calor por radiación, acentuándose el efecto para bajos OIs. La llama normal además posee una mayor fracción radiativa que la llama inversa.

Como perspectivas futuras dentro del contexto de este estudio se pueden mejorar los métodos o continuar los experimentos. A continuación se proponen ciertas mejores o extensiones del trabajo:

- Analizar distintos combustibles como propano y butano en condiciones similares a las realizadas en este caso para etileno, para tratar de encontrar comportamientos normalizados en la configuración de llama inversa.
- Estudiar mezclas de combustibles que sean representativas de algún otro combustible más complejo y tratar de entender el comportamiento de la mezcla a través del comportamiento individual de cada componente. De esta forma se podría estudiar en el laboratorio la forma más eficiente de quemar cualquier combustible comercial.
- A través de los resultados experimentales obtenidos se pueden validar modelos numéricos, por lo que en este caso con las llamas inversas se pueden desarrollar modelos de formación de hollín y comparar con los resultados experimentales para validarlos.
- Respecto al experimento, se encontraron muchas tendencias aproximadamente lineales cuando se aumentaba el OI en el rango estudiado, por lo que se podría aumentar aún más el índice de oxígeno para estudiar si este comportamiento se mantiene o se llega a algún punto de saturación.
- Respecto a la metodología, para calcular la temperatura se pueden utilizar distintos filtros de longitudes de onda mayor y comparar las temperaturas obtenidas para cada par de longitudes de onda escogidas, para optimizar la exactitud de los resultados obtenidos.

Todas estas recomendaciones y trabajos futuros servirán para comprender de una manera cada vez más acabada el proceso de combustión.

Bibliografía

- [1] J. Hansen. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., vol. 97, pp. 9875–9880, 2000.
- [2] G. Oberdörster, E. Oberdörster, and J. Oberdöster. *Environ. Health Perspect.*, vol. 113, pp. 823–839, 2005.
- [3] M. Jacobson. Nature, vol. 409, pp. 695–697, 2001.
- [4] B. Haynes and H. Wagner. Prog. Energy Combust. Sci., vol. 7, pp. 229–273, 1981.
- [5] C. Lautenberger, J. de Ris, N. Dembsey, J. Barnett, and H. Baum. Fire Safe, vol. 40, pp. 141– 176, 2005.
- [6] T. Jenkins and R. Hanson. Combust. Flame, vol. 126, pp. 1669–1679, 2001.
- [7] M. de Energía, "Antecedentes sobre la matriz energética en Chile y sus desafíos para el futuro," tech. rep., Gobierno de Chile, 2011.
- [8] J. Bertrán and E. Morales, "Potencial de generación de energía por residuos del manejo forestal en Chile," tech. rep., CNE, 2008.
- [9] I. Kennedy. Prog. Energy Combust. Sci., vol. 23, pp. 95–132, 1997.
- [10] H. Palmer and H. Cullis, The Chemistry and Physics of Carbon. 1965.
- [11] H. Bockhorn, Soot Formation in Combustion, Round Table Discussion. 1991.
- [12] W. Niessen, Combustion and Incineration Processes. Marce Dekker, 2002.
- [13] N. Peters. Twenty first Symposium on Combustion, pp. 1231–1250, 1986.
- [14] I. Glassman and R. Yetter, *Combustion*. Elsevier, 2008.
- [15] R. Schalla, T. Clark, and G. McDonald in NACA Report 1186, 1954.
- [16] R. Schalla and R. Hibbard, "Smoke and coke formation in combustion of hydrocarbon-air mixtures," in NACA Report 1300, 1959.
- [17] R. Milliken. J. Phys. Chem., vol. 66, p. 794, 1962.

- [18] I. Glassman. Twentysecond Symposium on Combustion, pp. 295–311, 1988.
- [19] W. Flower and C. Bowman. Combust. Sci. Technol., vol. 37, p. 93, 1984.
- [20] I. McLintock. Combust. Flame, vol. 12, pp. 217–225, 1968.
- [21] I. Glassman and P. Yaccarino. Combust. Sci. Technol., vol. 24, pp. 107–114, 1980.
- [22] M. Mikofski, T. Williams, C. Shaddix, A. Fernandez-Pello, and L. Blevins. Combust. Flame, vol. 149, pp. 463–478, 2007.
- [23] G. Sidebotham and I. Glassman. Combust. Flame, vol. 90, pp. 269–283, 1992.
- [24] K. Kang, J. Hwang, S. Chung, and W. Lee. Combust. Flame, vol. 109, pp. 266–281, 1997.
- [25] C. Shaddix, T. Williams, L. Blevins, and R. Schefer. Proc. Combust. Inst., vol. 30, pp. 1501– 1508, 2005.
- [26] J. Friend, The Chemistry of Combustion. Gurney & Jackson, 1922.
- [27] S. Burke and T. Schumann. Ind. Eng. Chem., (First Combustion Symposium), vol. 20, pp. 998– 1004, 1928.
- [28] H. McClure, W. Neeley, and J. Elliot. Chem. Eng. Prog., vol. 61, p. 52, 1965.
- [29] E. Perthuis. Combust. Flame, vol. 6, pp. 54–55, 1962.
- [30] J. Authur and D. Napier. Fifth Symposium on Combustion, pp. 303–315, 1955.
- [31] J. Walker. Sci. Amer., pp. 192–200, 1979.
- [32] K.-T. Wu and R. Essenhigh. Twentieth Symposium on Combustion, pp. 1925–1932, 1984.
- [33] E. Lee, K. Oh, and H. Shin. *Fuel*, vol. 84, pp. 543–550, 2005.
- [34] C. Kaplan and K. Kailasanath. Combust. Flame, vol. 124, pp. 275–294, 2001.
- [35] L. Blevins, R. Fletcher, B. B. Jr., E. Steel, and G. Mulholland. Proc. Combust. Inst., vol. 29, pp. 2325–2333, 2002.
- [36] M. Mikofski, T. Williams, C. Shaddix, and L. Blevins. Combust. Flame, vol. 146, pp. 63–72, 2006.
- [37] F. Roper. Combust. Flame, vol. 29, pp. 219–226, 1977.
- [38] F. Roper, C. Smith, and A. Cunningham. Combust. Flame, vol. 29, pp. 227–234, 1977.
- [39] K. Macko, M. Mikofski, C. Fernandez-Pello, L. Blevins., and R. Davis. Combustion Processes Laboratories, UC Berkeley, 2005.

- [40] Y. Jung, K. Oh, C. Bae, and H. Shin. Fuel, vol. 102, pp. 199–207, 2012.
- [41] G. Legros, P. Joulain, J.-P. Vantelon, A. Fuentes, D. Bertheau, and J. Torero. Combust. Sci. Technol., vol. 178, pp. 813–835, 2006.
- [42] W. Dalzell and A. Sarofim. J. Heat Transfer, vol. 91, p. 100, 1969.
- [43] H. Chang and T. Charalampopoulos. Proc. Roy. Soc. London, vol. 430, pp. 577–591, 1990.
- [44] C. Dasch. Appl. Opt., vol. 31, pp. 1146–1152, 1992.
- [45] K. Daun, K. Thomson, F. Liu, and G. Smallwood. Appl. Opt., vol. 45, pp. 4638–4646, 2006.
- [46] E. O. Akesson and K. J. Daun. Appl. Opt., vol. 47, pp. 407 416, 2008.
- [47] J. Hadamard, Lectures on Cauchy's Problem in Linear Differential Equations. Yale U. Press, 1923.
- [48] C. Hansen, Rank-Deficient and Discrete ill-Posed Problems: Numerical Aspects of Linear Inversion. SIAM, 1998.
- [49] A. Tikhonov. J. Eng. Phys., vol. 29, pp. 816–820, 1975.
- [50] C. Hansen and D. O'Leary. Society for Industrial and Applied Mathematics, vol. 14, pp. 1487– 1503, 1993.
- [51] M. Kashif, J. Bonnety, C. Morin, and G. Legros. Mid-term DA 104496 report, 2012.
- [52] L. Liu and J. Jiang. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, vol. 70, pp. 207–215, 2001.
- [53] D. Snelling, K. Thomson, G. Smallwood, L. Gülder, E. Weckman, and R. Fraser. AIAA, vol. 40, pp. 1789–1795, 2002.
- [54] P. Berg, D. Hill, A. Noble, G. Smith, and J. Jeffries. *Combust. Flame*, vol. 121, pp. 223–235, 2000.
- [55] B. Ko, K.-H. Cheong, and J.-Y. Nam. Fire Safety Journal, vol. 44, pp. 322–329, 2009.
- [56] S. Rudz, K. Chetehouna, O. Séro-Guilaume, E. Pastor, and E. Planas. Meas. Sci. Technol., vol. 20, p. 115501, 2009.
- [57] J. Taylor, An introduction to Error Analysis. University Science Books, 1997.
- [58] A. Fuentes, G. Legros, H. El-Rabii, J.-P. Vantelon, P.Joulain, and J. Torero. Experiments in Fluids, vol. 43, pp. 939–948, 2007.
- [59] F. Liu, D. Snelling, K. Thomson, and G. Smallwood. Appl. Phys. B: Lasers Opt., vol. 96, pp. 623–636, 2009.

- [60] W. Reynolds, Implementation in the interactive program STANJAN. 1986.
- [61] R. Santoro, Y. Yeh, J. Horvath, and H. Semerjian. Combust. Sci. Technol., vol. 53, pp. 89–115, 1987.
- [62] S. Turns, An introduction to combustion: concepts and applications. McGraw-Hill, 2000.
- [63] F. Escudero, R. Henriquez, R. Demarco, J.-L. Consalvi, F. Liu, J. Elicer, and A. Fuentes., "Effects of oxygen index on soot production in laminar coflow diffusion flames of C2 to C4 fuels.".
- [64] A. Fuentes, R. Henríquez, F. Nmira, F. Liu, and J. Consalvi. Combust. Flame, vol. 160, pp. 786– 795, 2013.
- [65] H. Guo, F. Liu, G. Smallwood, and L. Gülder. Combust. Flame, vol. 145, pp. 324–338, 2006.
- [66] D. Du, R. Axelbaum, and C. Law. Proc. Combust. Inst., vol. 23, pp. 1501–1507, 1990.
- [67] C. Leundsen and N. Peters. Proc. Combust. Inst., vol. 28, pp. 2619–2625, 2000.
- [68] K. Lee, C. Megaridis, S. Zelepouga, A. Saveliev, L. Kennedy, O. Charon, and F. Ammouri. Combust. Flame, vol. 121, pp. 323–333, 2000.
- [69] O. Angrill, H. Geitlinger, T. Streibel, R. Suntz, and H. Bockhorn. Proc. Combust. Inst., vol. 28, pp. 2643–2649, 2000.